

FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH
Jülich Supercomputing Centre
D-52425 Jülich, Tel. (02461) 61-6402

Interner Bericht

**Optimierung
des Multipol-Akzeptanz Kriteriums
im Barnes-Hut Baumalgorithmus**

Marc Keldenich

FZJ-JSC-IB-2008-04

Januar 2008

(letzte Änderung: 16.01.2008)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung / Ziel der Diplomarbeit	1
2	Vielteilchensysteme	3
3	Barnes-Hut Baualgorithmus	7
3.1	Grundidee	7
3.2	Pseudoteilchen	7
3.3	Multipole	8
3.4	Aufbau des Baums	10
3.5	Quadtree / Octree	12
3.6	Startverteilung	13
3.7	Ablauf des Algorithmus	16
3.8	Implementierung in PEPC	17
4	Multipol-Akzeptanz Kriterium / MAC	19
4.1	Was ist ein MAC?	19
4.2	Barnes-Hut MAC	21
4.3	Minimum Distance MAC	21
4.3.1	Implementierung MD MAC	22
4.4	B_{max} MAC	23
4.5	Erweiterung B_{max} MAC	24
4.6	E-Feld MAC	25
5	Vergleich der MACs	30
5.1	Verhalten der θ -gesteuerten MACs bei mehrfach verklumpeter Verteilung	30
5.1.1	Test mit rein positiver Ladungsverteilung	32
5.1.2	Test mit positiver und negativer Ladungsverteilung	34
5.1.3	Zusammenfassung verklumpete Verteilungen	35
5.2	Effizienztests	36
5.2.1	Beschreibung der Testreihe	36
5.2.2	Erstellung der empirischen Verteilungsfunktionen	36
5.3	Vergleich der θ -gesteuerten MACs	38
5.4	Vergleich erweiterter B_{max} MAC mit Barnes-Hut	40
5.5	Vergleich E-Feld MAC mit Barnes-Hut	42
5.5.1	Homogene Kugel mit neutraler Ladungsverteilung	42
5.5.2	Homogene Kugel mit rein positiver Ladungsverteilung	43
5.5.3	Plummierteilte Teilchen	44
6	Zusammenfassung	47

7	Ausblick	49
A	Taylorscher Satz	51
	Literaturverzeichnis	52

Abbildungsverzeichnis

2.1	Vergleich Lennard-Jones Potenzial mit Coulomb Potenzial	4
2.2	Periodische im Vergleich zu nicht periodischen Randbedingungen	5
3.1	Pseudoteilchen	8
3.2	Simulationsgebiet	10
3.3	Baumaufbau 1	11
3.4	Baumaufbau 2	12
3.5	Quadtree	12
3.6	Zufällige Verteilung von 1000 Teilchen in einer Kugel	15
3.7	Plummergebiet von 1000 Teilchen	15
3.8	Barnes-Hut Algorithmus	16
3.9	Verlaufdiagramm zum Barnes-Hut Baumalgorithmus	17
4.1	Barnes-Hut MAC	21
4.2	Minimum Distance MAC	22
4.3	Implementierung MD MAC	23
4.4	B_{max} MAC	24
4.5	Inhomogene und homogene Teilchenverteilung innerhalb einer Box	28
5.1	Problem Barnes-Hut erstes Beispiel	31
5.2	Problem Barnes-Hut zweites Beispiel	31
5.3	Verklumpete Verteilung Barnes-Hut positiv	33
5.4	Verklumpete Verteilung MD positiv	33
5.5	Verklumpete Verteilung B_{max} positiv	33
5.6	Verklumpete Verteilung Barnes-Hut neutral	34
5.7	Verklumpete Verteilung MD neutral	34
5.8	Verklumpete Verteilung B_{max} neutral	35
5.9	Fehlerverteilungen der θ -gesteuerten MACs	38
5.10	Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit der θ -gesteuerten MACs, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$	39
5.11	Effizienzvergleich Barnes-Hut mit erweitertem B_{max}	41
5.12	Fehlerverteilungen E-Feld MAC, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$	42
5.13	Anzahl Multipole zu relativem Fehler	43
5.14	Anzahl Multipole zu relativem Fehler	45

Tabellenverzeichnis

5.1	Beispiel Fehlerverteilungen	37
5.2	Beispiel Fehlerverteilungen mit prozentualer Auswertung	37
5.3	Vergleich der Zeiten und der 95 % Genauigkeiten der θ -gesteuerten MACs, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$	38
5.4	Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit der θ -gesteuerten MACs, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$	40
5.5	Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit von Barnes-Hut und E-Feld MAC, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$	42
5.6	Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit von Barnes-Hut und E-Feld MAC, homogene Kugel mit $n_e = 5000$, $n_i = 0$	44
5.7	Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit von Barnes-Hut und E-Feld MAC, Plummerverteilung mit $n_e = 5000$, $n_i = 0$	44
5.8	Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit von Barnes-Hut und E-Feld MAC, Plummerverteilung mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$	45

Kapitel 1

Einleitung / Ziel der Diplomarbeit

Heutzutage spielen numerische Computersimulationen von naturwissenschaftlichen Zusammenhängen eine entscheidende Rolle in der Forschung. Um möglichst komplexe Vorgänge darstellen zu können, benötigt man Hochleistungsrechner, die aufgrund ihrer Mehrprozessorarchitektur Rechnungen parallel durchführen oder gleichzeitig unabhängige Programmteile bearbeiten können. Ein Hauptaugenmerk bei der Nutzung von Hochleistungsrechnern liegt trotz der steigenden Rechenkapazität auf der Optimierung von Algorithmen bezüglich ihrer Ausführungszeit bzw. Komplexität. Die Nachfrage an Rechenzeit, wie sie zum Beispiel auf den Großrechnern JUMP und JUBL innerhalb des Jülich Supercomputing Centre (JSC) des Forschungszentrums Jülich (FZJ) angemietet werden kann, wird immer größer. Die steigende Auslastung der Rechner führt zu langen Wartezeiten einzelner Simulationen. Schnellere Algorithmen fördern somit einen höheren Rechendurchsatz und damit eine effizientere Nutzung der Rechnerressourcen.

Die Tatsache, dass einige Simulationen aufgrund zu hoher Komplexität der Algorithmen nicht realisierbar sind, liefert einen weiteren Grund Rechenzeit zu reduzieren. In Teilen der Astro- und Plasmaphysik beschäftigt man sich mit der Dynamik von Teilchensystemen. Um ein, im Sinne der Physik, aussagekräftiges Ergebnis zu erreichen, werden viele tausend geladene Teilchen über lange Zeitintervalle hinweg simuliert. Algorithmen, die diese Vorgänge im Rahmen der Rechengenauigkeit der Computer exakt durchführen, skalieren mit einer Komplexität von $O(N^2)$. Die Rechenzeit für einige dieser Simulationen könnte auf aktuellen Großrechnern nicht aufgebracht werden.

Der Ansatz zur Reduzierung der Komplexität dieser Algorithmen beruht auf der Idee, eine solche Simulation nur genähert, also nicht exakt, durchzuführen. Trotz relativer Fehler der Größenord-

nung 10^{-2} bis 10^{-4} lassen sich physikalisch hinreichend präzise Aussagen über die Gesamtheit der Teilchensimulation treffen. Eine Bibliothek dieser numerischen Näherungsalgorithmen wird derzeit im JSC von der **C**omplex **A**tomistic **M**odeling and **S**imulation (CAMS) - Gruppe [13] entwickelt.

Diese Diplomarbeit beschäftigt sich mit dem Programm PEPC [12], welches eine Implementierung des Barnes-Hut Baumalgorithmus beinhaltet. Die Grundidee von Barnes-Hut basiert auf der Approximation der Kräfte bzw. Potenziale. Die einzelnen Teilchen werden zu so genannten Pseudoteilchen gruppiert, deren Potenziale bzw. Kräfte durch eine Taylorentwicklung angenähert werden. Die Komplexität des Algorithmus sinkt durch dieses Verfahren von $O(N^2)$ auf $O(N \log N)$. Ein Vorteil von PEPC gegenüber vergleichbaren Algorithmen zeigt sich bei der Berechnung verschiedener Teilchenverteilungen und der Parallelisierbarkeit. Durch die gitterfreie Baumstruktur lassen sich nahezu beliebige Ladungsverteilungen berechnen und die Aufteilung der Rechnung auf mehrere Prozessoren kann mit einem geringen Anteil an Kommunikation realisiert werden.

Ziel dieser Arbeit ist es, den Zusammenhang von Rechengenauigkeit und Rechenaufwand zu untersuchen und gegebenenfalls zu verbessern. Die durch die Approximation auftretenden Fehler sollen bei geringem Aufwand möglichst klein gehalten werden. Eine entscheidende Rolle innerhalb von PEPC spielt dabei der so genannte MAC. Dieser gibt eine Vorschrift an, nach der die Pseudoteilchen angenähert werden. Zu dem bereits vorhandenen Barnes-Hut MAC werden zunächst zwei vergleichbar arbeitende MACs in PEPC implementiert. Diese sollen eine Schwäche von Barnes-Hut bei mehrfach verklumpter Ladungsverteilung beheben. Die Gemeinsamkeit dieser drei MACs ist die Eigenschaft, dass sie ausschließlich auf Basis der gegebenen Verteilung der Teilchen die Approximationsgenauigkeit des Algorithmus steuern. Später wird ein weiterer MAC hergeleitet und implementiert. Mit Hilfe von Informationen über das elektrische Feld aus dem vorhergehenden Zeitschritt soll dieser die Recheneffizienz gegenüber den anderen MACs verbessern.

Anhand von zwei verschiedenen Verteilungen der Teilchen wurden die MACs auf ihre Approximationsqualität untersucht. Zum einen wurde eine Kugel ausgewählt, in der die Teilchen per Zufallsgenerator aufgeteilt werden, zum anderen wurde mit Hilfe einer Verteilungsfunktion eine nicht homogene Aufteilung der Teilchen gewählt. Beide Konfigurationen wurden sowohl mit ausschließlich positiver als auch mit insgesamt neutraler Ladung des Gesamtsystems getestet.

Kapitel 2

Vielteilchensysteme

In der modernen Physik gewinnt die Simulation von Vielteilchensystemen immer mehr an Bedeutung. Teile der Astrophysik beschäftigen sich mit der inneren Bewegung von Sternenhaufen oder mit der Dynamik von Galaxien. Sowohl die Sternenhaufen als auch die Galaxien können aus 10^5 bis 10^6 Sternen bzw. Planeten bestehen. Der Zusammenhalt bzw. die Bewegung dieser Galaxien basiert auf der Gravitationskraft:

$$F = G \frac{m_1 \cdot m_2}{r^2} \quad (2.1)$$

m_1 und m_2 sind die Massen von zwei verschiedenen Körpern, G ist die Gravitationskonstante und r ist der Abstand der Körper. Aus dieser Formel wird ersichtlich, dass durch das Auftreten zweier Massen eine Kraft erzeugt wird. Das bedeutet für eine Galaxie oder einen Sternenhaufen, dass durch jedes Sternenpaar dieser 10^5 bis 10^6 Einzelsterne eine Kraftwechselwirkung stattfindet. Diese Gravitationskräfte beeinflussen die Bewegung und das Aussehen einer Galaxie bzw. eines Sternenhaufens. Die Astrophysik erhofft sich, durch die zeitliche Simulation dieser Sternensysteme Rückschlüsse auf die Entstehung unseres Sonnensystems ziehen zu können.

In der Plasmaphysik untersucht man Teilchensysteme, deren einzelne Teilchen Ladungen und sehr kleine Massen besitzen. Daher wird die Teilchenwechselwirkung im Gegensatz zur Astrophysik nicht durch die Masse, sondern durch die Ladung bewirkt. Auch hier beobachtet man das zeitliche Verhalten des Gesamtsystems. Teilchen gleicher Ladung stoßen sich ab, unterschiedliche Ladungsträger ziehen sich an. Generell sind Plasmen quasineutral, es existieren ebenso viele positive wie negative Teilchen. Die Bewegung der Ladungsträger innerhalb eines Plasmas wird durch die Kraftausübung der anderen Teilchen beeinflusst. Sie können beschleunigt oder gebremst werden. Die Richtung der

Bewegung eines Teilchens kann durch die anderen Teilchen geändert werden. Diese Wechselwirkungen werden naturgemäß im dreidimensionalen Raum betrachtet und simuliert.

In neutralen, molekularen Gasen geht man davon aus, dass weit entfernte Teilchen einen sehr geringen, beinahe zu vernachlässigenden Einfluss bei der Kräfteberechnung ausüben. Für solche Systeme verwendet man ein so genanntes kurzreichweitiges Potenzial. Ein Beispiel ist das Lennard-Jones Potenzial:

$$\Phi_{LJ} = 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right) \quad (2.2)$$

Mit σ wird der Durchmesser des Teilchens, mit r der Abstand zweier Teilchen und mit ϵ die Energiekonstante bezeichnet.

In dieser Arbeit wird das langreichweitige Coulomb Potenzial verwendet:

$$\Phi_C = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.3)$$

Mit q_1 und q_2 werden die Ladungen und mit r der Abstand zweier Teilchen zueinander bezeichnet. ϵ_0 stellt die Dielektrizitätskonstante dar. Weit entfernte Teilchen üben zwar eine relativ schwache Kraft aus, jedoch wird diese, im Gegensatz zum Lennard-Jones Potenzial, bei der Berechnung berücksichtigt.

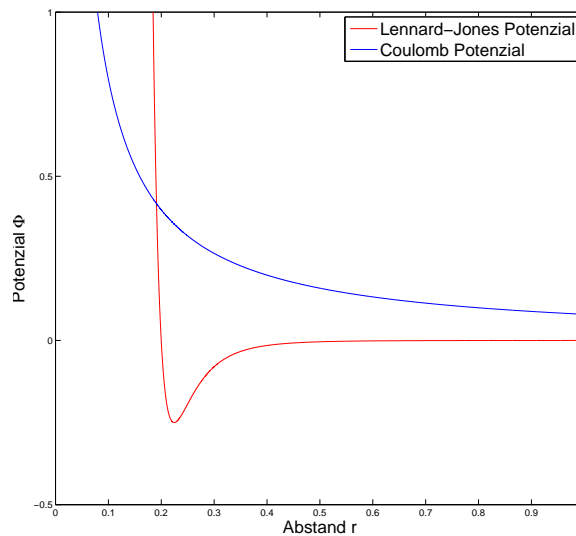


Abbildung 2.1: Vergleich Lennard-Jones Potenzial mit Coulomb Potenzial

Die Bestimmung der Orte bzw. der Geschwindigkeiten der Teilchen beruht auf der Newtonschen Bewegungsgleichung:

$$m_i \frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2} = F_i(x_1, \dots, x_N, t) \quad (2.4)$$

Diese gewöhnliche Differenzialgleichung zweiter Ordnung muss in jedem Zeitschritt für jedes Teilchen gelöst werden. Dies geschieht numerisch mit Hilfe eines Integrationsschemas in Zeitrichtung. Die dabei auftretenden Fehler hängen vom ausgewählten Schema ab und liegen typischerweise in der Größenordnung von 10^{-2} bis 10^{-4} . Bei der Kraft- bzw. Potenzialberechnung kann daher auf eine exakte Berechnung verzichtet werden. Mit der Beziehung $F = -\nabla\Phi_C$ erhält man aus dem Potenzial (2.3) die rechte Seite der Gleichung (2.4):

$$m_i \frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2} = -\nabla\Phi_{iC} \quad (2.5)$$

Da jedes der N Teilchen mit $N - 1$ anderen Teilchen in Wechselwirkung tritt, benötigt der Algorithmus $\frac{N(N-1)}{2}$ Rechnungen pro Zeitschritt. Die dabei ausgenutzte Symmetrie, die durch das dritte Newtonsche Axiom *actio = reactio* hervorgerufen wird, halbiert zwar den Rechenaufwand, verändert jedoch nicht die Komplexität. In realen Vielteilchensimulationen über mehrere tausend Zeitschritte kommt es vor, dass eine Simulation von 10^5 Teilchen z.B. einen Tag dauert. Aufgrund der Komplexität von $O(N^2)$ würde eine Simulation von 10^6 Teilchen mit gleicher Anzahl an Zeitschritten 100 Tage dauern. Daher ist es unabdingbar, die Komplexität der Algorithmen zu verringern und somit diese Art der Simulationen zu beschleunigen. Eine Auswahl an Implementierungen mit geringerer Komplexität wird in Form einer **Fast Coulomb Solver** (FCS) Bibliothek im JSC des Forschungszentrums Jülich derzeit entwickelt.

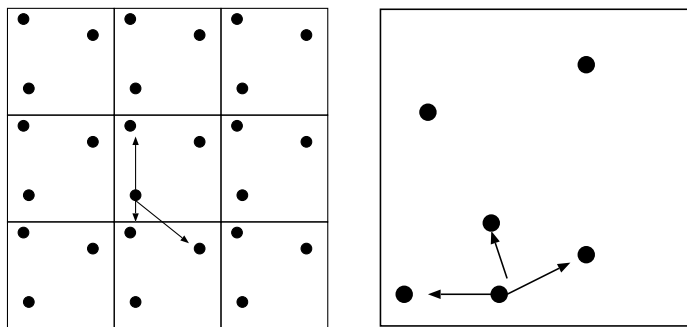


Abbildung 2.2: Periodische im Vergleich zu nicht periodischen Randbedingungen

Für Vielteilchensysteme mit periodischen Randbedingungen wird die Ewald-Summation und die Particle-Particle-Particle-Mesh Methode (P3M) verwendet. Teilchensysteme mit offenen Rändern werden unter anderem mit der Fast-Multipol-Methode (FMM) behandelt. Der in dieser Arbeit verwendete Barnes-Hut Baumalgorithmus behandelt ebenfalls Systeme mit offenen Rändern und reduziert die Komplexität des Algorithmus auf $O(N \log N)$.

Kapitel 3

Barnes-Hut Baumalgorithmus

3.1 Grundidee

Das besondere Merkmal des Barnes-Hut Baumalgorithmus ist die Organisation der Teilchen bzw. der Zusammenschluss mehrerer Teilchen zu so genannten Pseudoteilchen oder Teilchenclustern, die wie einzelne Teilchen behandelt werden können. Ihre Lage und ihre Ladung berechnet sich aus den Daten der einzelnen Ladungsträger. Die Kraft bzw. das Potenzial der Pseudoteilchen wird approximativ berechnet. Man nennt diese numerische Näherung Multipole.

Organisiert werden die Multipole in einer Baumstruktur. Diese hierarchische Aufteilung beschleunigt den Durchlauf des Teilchensystems und reduziert die Komplexität des Algorithmus auf $O(N \log N)$.

3.2 Pseudoteilchen

Als Pseudoteilchen bezeichnet man den Zusammenschluss von n Einzelteilchen zu einem Teilchen, dessen Ladung die Summe der Einzelladungen:

$$\sum_{i=1}^n q_i \tag{3.1}$$

beträgt. Die Position des Pseudoteilchens wird durch das Ladungszentrum, errechnet durch die

Lage der Einzelteilchen, definiert:

$$\vec{r}_{Pseudo} = \frac{\sum_{i=1}^n |q_i| \cdot \vec{r}_i}{\sum_{i=1}^n |q_i|} \quad (3.2)$$

Das Gesamtpotenzial, bezogen auf ein einzelnes, außerhalb des Pseudoteilchens gelegenes Teilchen, beträgt:

$$\Phi(\vec{R}) = \sum_{i=1}^n \frac{q_i}{|\vec{R}_i|} \quad (3.3)$$

Graphik (3.1) zeigt den Zusammenschluss von drei Teilchen zu einem Pseudoteilchen. Mit r_i werden die Vektoren der einzelnen Teilchen zum Ladungszentrum des Pseudoteilchens bezeichnet. Der Vektor vom Einzelteilchen P zum Zentrum des Multipols wird mit \vec{R} , die Vektoren vom Einzelteilchen P zu den einzelnen Ladungsträgern des Pseudoteilchens mit R_i bezeichnet.

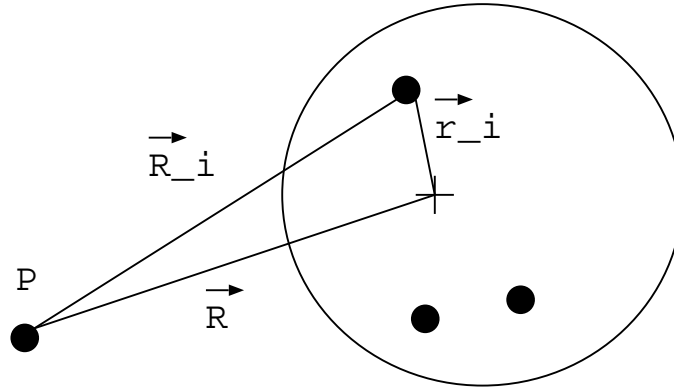


Abbildung 3.1: Pseudoteilchen

3.3 Multipole

Das Ziel des Barnes-Hut Baumalgorithmus besteht darin, die Rechenzeit durch Approximation der Kräfte bzw. Potenziale zu reduzieren. Zu diesem Zweck gruppiert man Einzelteilchen zu den oben beschriebenen Pseudoteilchen. Die Kraft bzw. die Potenzialwirkung eines Pseudoteilchens auf ein Einzelteilchen P wird durch eine Taylorentwicklung der Potenzialfunktion:

$$\Phi(\vec{R}) = \sum_{i=1}^n \frac{q_i}{|\vec{R}_i|} = \sum_{i=1}^n \frac{q_i}{|\vec{R} - \vec{r}_i|} = \sum_{i=1}^n \Phi_i(\vec{R} - \vec{r}_i) \quad (3.4)$$

approximiert. Zunächst entwickelt man $\Phi_i(\vec{R} - \vec{r}_i) = \frac{q_i}{|\vec{R} - \vec{r}_i|}$ nach Formel (A.1) um \vec{R} :

$$\begin{aligned}
\Phi_i(\vec{R} - \vec{r}_i) &= \Phi_i(\vec{R}) + \nabla \Phi_i(\vec{R}) \cdot (\vec{R} - \vec{r}_i - \vec{R}) + O\left(\frac{r_i^2 \partial^2 \Phi_i(\vec{R})}{\partial^2 r}\right) \\
&= \Phi_i(\vec{R}) + \nabla \Phi_i(\vec{R}) \cdot (-\vec{r}_i) + O\left(\frac{r_i^2 \partial^2 \Phi_i(\vec{R})}{\partial^2 r}\right)
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Bildet man anschließend die Summe der Φ_i , erhält man:

$$\sum_{i=1}^n \Phi_i(\vec{R} - \vec{r}_i) = \Phi(\vec{R}) = \sum_{i=1}^n \Phi_i(\vec{R}) + \nabla \Phi_i(\vec{R}) \cdot (-\vec{r}_i) + O\left(\frac{r_i^2 \partial^2 \Phi_i(\vec{R})}{\partial^2 r}\right) \tag{3.6}$$

Führt man die Entwicklung nach Formel (A.1) bis zur dritten Ordnung weiter, ergibt sich folgende Näherungsformel:

$$\begin{aligned}
\Phi(\vec{R}) &\approx \sum_{i=1}^n q_i \left\{ \frac{1}{|\vec{R}|} \right. \\
&+ x_i \frac{x}{|\vec{R}|^3} + y_i \frac{y}{|\vec{R}|^3} + z_i \frac{z}{|\vec{R}|^3} \\
&+ \frac{1}{2} \left[x_i^2 \left(-\frac{1}{|\vec{R}|^3} + \frac{3x^2}{|\vec{R}|^5} \right) + y_i^2 \left(-\frac{1}{|\vec{R}|^3} + \frac{3y^2}{|\vec{R}|^5} \right) + z_i^2 \left(-\frac{1}{|\vec{R}|^3} + \frac{3z^2}{|\vec{R}|^5} \right) \right] \\
&+ x_i y_i \frac{3xy}{|\vec{R}|^5} + x_i z_i \frac{3xz}{|\vec{R}|^5} + y_i z_i \frac{3yz}{|\vec{R}|^5} \\
&+ \frac{1}{6} \left[x_i^3 \left(-\frac{9x}{|\vec{R}|^5} + \frac{15x^3}{|\vec{R}|^7} \right) + y_i^3 \left(-\frac{9y}{|\vec{R}|^5} + \frac{15y^3}{|\vec{R}|^7} \right) + z_i^3 \left(-\frac{9z}{|\vec{R}|^5} + \frac{15z^3}{|\vec{R}|^7} \right) \right] \\
&+ \frac{1}{2} \left[x_i^2 y_i \left(-\frac{3y}{|\vec{R}|^5} + \frac{15x^2 y}{|\vec{R}|^7} \right) + x_i^2 z_i \left(-\frac{3z}{|\vec{R}|^5} + \frac{15x^2 z}{|\vec{R}|^7} \right) + y_i^2 x_i \left(-\frac{3x}{|\vec{R}|^5} + \frac{15y^2 x}{|\vec{R}|^7} \right) \right. \\
&+ y_i^2 z_i \left(-\frac{3z}{|\vec{R}|^5} + \frac{15y^2 z}{|\vec{R}|^7} \right) + z_i^2 x_i \left(-\frac{3x}{|\vec{R}|^5} + \frac{15z^2 x}{|\vec{R}|^7} \right) + z_i^2 y_i \left(-\frac{3y}{|\vec{R}|^5} + \frac{15z^2 y}{|\vec{R}|^7} \right) \left. \right] \\
&+ \left. x_i y_i z_i \frac{15xyz}{|\vec{R}|^7} \right\} \tag{3.7}
\end{aligned}$$

mit $\vec{R} = (x, y, z)$ und $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$. Der erste Term, $\sum_{i=1}^n q_i \frac{1}{|\vec{R}|}$, wird Monopol, Terme der ersten Ableitung Dipole, Terme der zweiten Ableitung Quadrupole usw. genannt. Durch diese Approximation der Potenzialfunktion werden aus den Pseudoteilchen die Multipole.

Multipole sind unabhängig von den Vektoren \vec{R}_i und damit unabhängig von der Position des gerade betrachteten Teilchens P . Sie hängen lediglich vom Verbindungsvektor \vec{R} des Multipolmittelpunkts mit dem Teilchen P und von \vec{r}_i , dem Abstandsvektor des Multipolmittelpunkts mit den einzelnen

Teilchen des Multipols, ab. Diese Unabhängigkeit ist der Hauptgrund für die Reduzierung der Komplexität des Algorithmus. Vor dem eigentlichen Baumdurchlauf können die Kräfte bzw. Potenziale der Multipole berechnet werden, da sowohl der Multipolmittelpunkt als auch die Position der einzelnen Teilchen bekannt sind. Durch diese Vorrechnung und die Unabhängigkeit der Multipole von der Position des gerade betrachteten Teilchens P , ersetzt ein Multipol, bestehend aus n Teilchen, in der Berechnung der Potenziale bzw. Kräfte diese n Teilchen. Anstelle der zur exakten Berechnung benötigten n Rechnungen wird nur eine Rechnung ausgeführt. Die Summenbildung der einzelnen Potenzialfunktionen $\Phi_i(\vec{R} - \vec{r}_i)$ aus (3.6) entfällt. Der Zeitgewinn, der durch das Einsparen der Summenberechnung entsteht, geht allerdings zu Lasten der Genauigkeit, da die Multipole nur eine Näherung der exakten Potenziale der n Teilchen darstellen. Es entsteht ein numerischer Fehler in der Potenzial- bzw. Kräfteberechnung. Je weiter man diese Taylorentwicklung fortführt, desto kleiner wird der numerische Fehler. Jedoch steigt bei höherer Entwicklungsordnung die Rechendauer. Üblicherweise wird in einem Baumalgorithmus das Potenzial $\Phi(\vec{R})$ bis zu den Quadrupoltermen entwickelt, so dass man die dritten partiellen Ableitungen bei der Approximation verwendet.

3.4 Aufbau des Baums

Der Barnes-Hut Algorithmus ordnet die Teilchen bzw. Pseudoteilchen in einer Baumstruktur an. Dabei wird das betrachtete, dreidimensionale Simulationsgebiet stufenweise in gleichgroße Würfel unterteilt. In den dargestellten Abbildungen werden zur Veranschaulichung zweidimensionale Graphiken verwendet. An folgendem Simulationsgebiet soll das Prinzip des Baumaufbaus gezeigt werden:

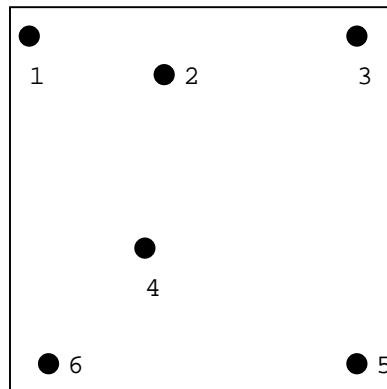


Abbildung 3.2: Simulationsgebiet

Diese sechs Teilchen und die dazugehörigen Pseudoteilchen bzw. Multipole werden nun nacheinander in den Baum eingehängt. Die oberste Stufe des Baums ist das Simulationsgebiet selbst. Die Wurzel des Baums bilden alle sechs Teilchen. In Stufe zwei wird das Gebiet in vier gleichgroße Quadrate bzw. Boxen (dreidimensional wären es acht Würfel) unterteilt. Diese Boxen werden auf der zweiten Stufe des Baums angeordnet. Aufgrund dieser Unterteilungsweise nennt man die Baumstruktur auch Quadtree (2d) bzw. Octree (3d). Befindet sich in einer Box kein Teilchen, wird sie im Baufbau nicht weiter berücksichtigt. Eine Box, die nur ein Teilchen enthält, wird nicht weiter unterteilt (s. Abb. 3.3). Dieses Verfahren arbeitet so lange, bis sich in jeder Box maximal ein Teilchen befindet.

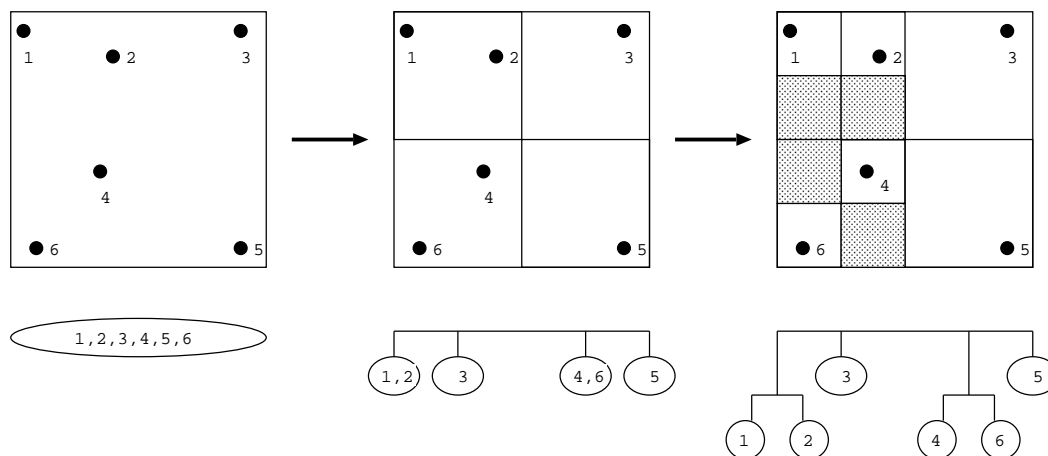


Abbildung 3.3: Baufaltung 1

Im zweiten Abschnitt des Baufaltungsalgorithmus, beginnend auf dem untersten Level des Baums, rekursiv die einzelnen Teilchen zu Multipolen zusammen. Der Multipol, der auf der obersten Stufe gebildet wird, besteht aus allen Teilchen des Simulationsgebiets. Die Multipole der untersten Stufe sind die Teilchen selbst. Hier findet also keine Approximation statt. Auf Stufe zwei werden die Teilchen 1, 2 und 4, 6 jeweils zu einem Multipol zusammengefasst (s. Abb. 3.4).

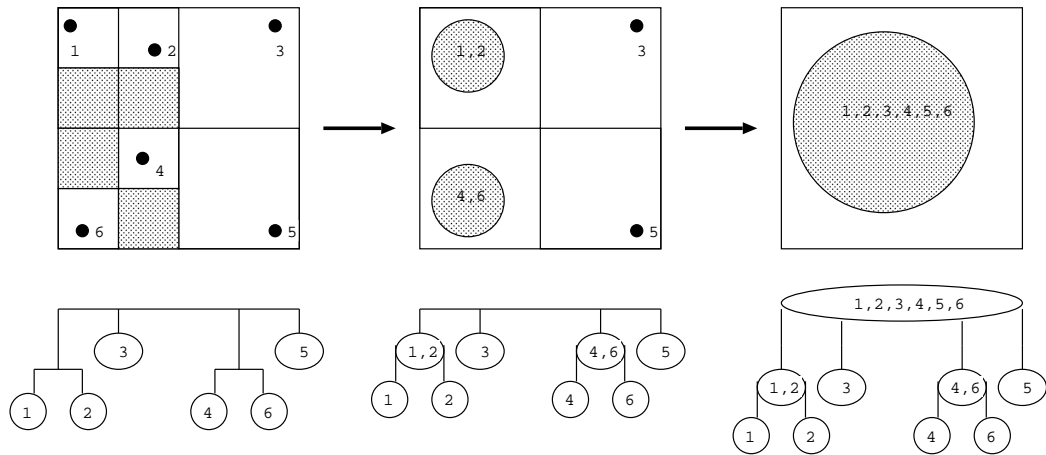


Abbildung 3.4: Baumaufbau 2

Auf der Grundlage dieses Baums werden anschließend die Kräfte bzw. Potenziale berechnet.

3.5 Quadtree / Octree

Die zur Speicherung der Boxen verwendete Datenstruktur nennt man Quadtree (2d) oder Octree (3d). Der Name leitet sich daher ab, dass bei vollbesetztem Baum, beginnend mit der Wurzel, jeder Vaterknoten vier (2d) bzw. acht (3d) Tochterknoten besitzt. Als Wurzel dient die Box, die das gesamte Simulationsgebiet umschließt. Unterteilt man, wie in Abbildung (3.5) dargestellt, die Wurzelbox in vier gleichgroße Unterboxen, so erhält man die Knoten des zweiten Baumlevels. Die nächsten Level des Baums werden ebenso durch Aufteilung der Knoten des übergeordneten Levels erzeugt.

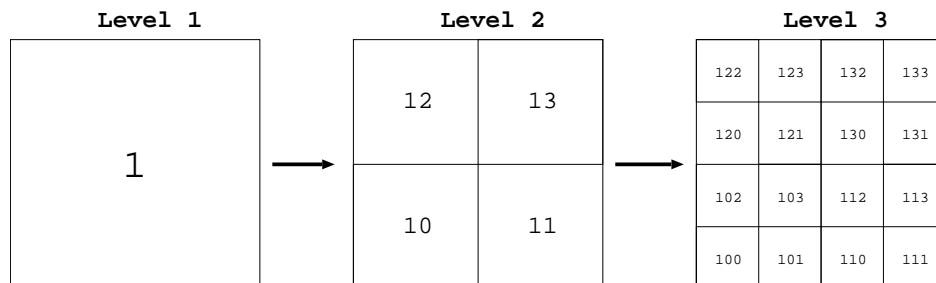


Abbildung 3.5: Quadtree

Nummeriert werden die Knoten des Baums mit Zahlen des Quartärsystems (2d) oder des Oktal-

systems (3d). Im Zweidimensionalen erhält die Wurzel die Zahl 1_4 , die Knoten des zweiten Levels erhalten die Zahlen $10_4, 11_4, 12_4, 13_4$. Diese Unterteilung wird, wie Abbildung (3.5) zeigt, in den weiteren Ebenen des Baums fortgeführt. Aus der gewählten Zahlendarstellung lassen sich zwei entscheidende algorithmische Vorteile gegenüber einer Nummerierung durch das Dezimalsystem herleiten. Zum einen gibt die Anzahl der Ziffern einer Zahl das Baumlevel der Box an. Beispielsweise befindet sich die Box mit der Nummer 112_4 auf Level 3. Damit verbunden kann aus der Leveltiefe unmittelbar die Kantenlänge der jeweiligen Boxen berechnet werden:

$$L_{Box} = \frac{L_{Wurzel}}{2^{Boxlevel-1}} \quad (3.8)$$

Die Boxenlänge wird später zur Berechnung der Multipollisten benötigt und muss durch dieses Verfahren nicht zusätzlich abgespeichert werden.

Zum anderen vereinfacht die Speicherung in Quartär- bzw. Oktalzahlen den Baumdurchlauf, da die Knoten eines tiefen Baumlevels eindeutig den übergeordneten Leveln zugeordnet werden können. Möchte man in einem zweidimensionalen Gebiet die Kinderknoten eines Vaterknotens bestimmen, so nimmt man den Quartärschlüssel des Vaters und hängt die Ziffern 0 bis 3 an. Der Schlüssel verlängert sich auf jedem Level um eine Ziffer. Beispielsweise erhält man auf Baumlevel vier die Kinder $1120_4, 1121_4, 1122_4, 1123_4$ des Vaterknotens 112_4 auf Level drei. Auf die Speicherplätze der Kinderknoten kann also ohne zusätzliche Information zugegriffen werden. Der direkte Zugriff auf die Daten spart zum einen Speicherplatz und zum anderen beschleunigt er den Durchlauf des Baums.

3.6 Startverteilung

Bevor der eigentliche Algorithmus beginnt, konfiguriert man eine Anzahl an Teilchen, deren Verhalten in einem dreidimensionalen Gebiet simuliert werden soll. Sowohl die Verteilung der Teilchen als auch die Form und Größe des Gebiets werden generell vom physikalischen Kontext bestimmt. Durch Definition eines Koordinatensystems wird die Lage der Teilchen innerhalb des Simulationsgebiets eindeutig festgelegt. Die Ladungsverteilung der einzelnen Teilchen kann ebenfalls individuell bestimmt werden. Möchte man erreichen, dass sich die Gesamtladung des Systems neutral darstellt, so belegt man die eine Hälfte der Teilchen mit positiver ($q_i = 1$) und die andere Hälfte der Teilchen mit negativer ($q_i = -1$) Ladung, so dass $\sum_i^n q_i = 0$ ist. Ein geladenes Simulationssystem erhält

man, indem sich die Anzahl der negativen und der positiven Ladungen unterscheidet, $\sum_i q_i \neq 0$. Die exakte Position der Teilchen kann mit einem Vektor aus dem \mathbb{R}^3 angegeben werden. In den Abbildungen 3.6 und 3.7 werden zwei typische Startverteilungen dargestellt. Die erste Verteilung zeigt eine Anzahl von 1000 Teilchen innerhalb einer Kugel. Die Position der Teilchen wurde mit Hilfe eines Zufallszahlengenerators, dessen Verteilung auf $[0,1]$ gleichverteilt ist, festgelegt. Die hier definierte Kugel hat den Radius 0.5 und den Mittelpunkt $(0.5,0.5,0.5)$ und liegt damit im ersten Oktanten des selbstdefinierten dreidimensionalen Koordinatensystems.

Abbildung 3.7 zeigt eine Verteilung von ebenfalls 1000 Teilchen, die mit Hilfe der Plummerverteilung erzeugt wurde. Die Dichtefunktion dieser Verteilung lautet:

$$f(x) = \frac{p_0}{(1 + (\frac{x}{r_c})^2)^{\frac{5}{2}}} \quad (3.9)$$

Als Parameter wurden $p_0 = 15/4$ und $r_c = 0.2$ gewählt.

Vergleicht man diese Verteilungen, fällt auf, dass sich bei der Plummerverteilung ein Großteil der Teilchen auf relativ kleinem Raum häuft. Hingegen kann die Verteilung der Teilchen innerhalb der Kugel als homogen angesehen werden.

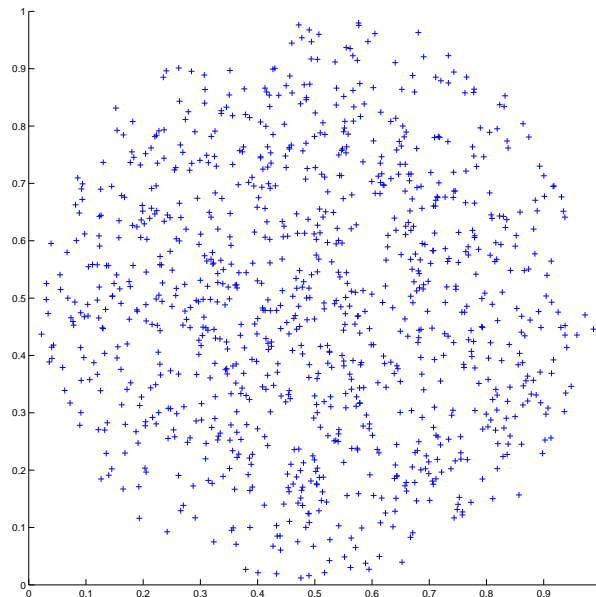


Abbildung 3.6: Zufällige Verteilung von 1000 Teilchen in einer Kugel

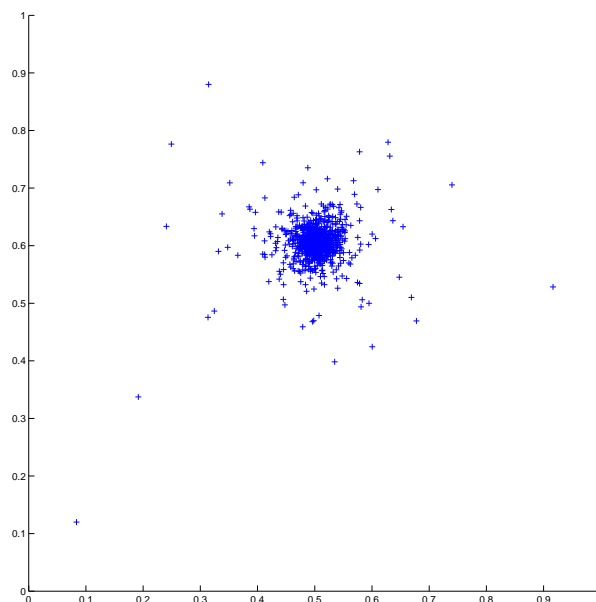


Abbildung 3.7: Plummerverteilung von 1000 Teilchen

3.7 Ablauf des Algorithmus

Die grobe Struktur des Barnes-Hut Baumalgorithmus besteht im Wesentlichen aus vier Teilen, die jeweils pro Zeitschritt ausgeführt werden.

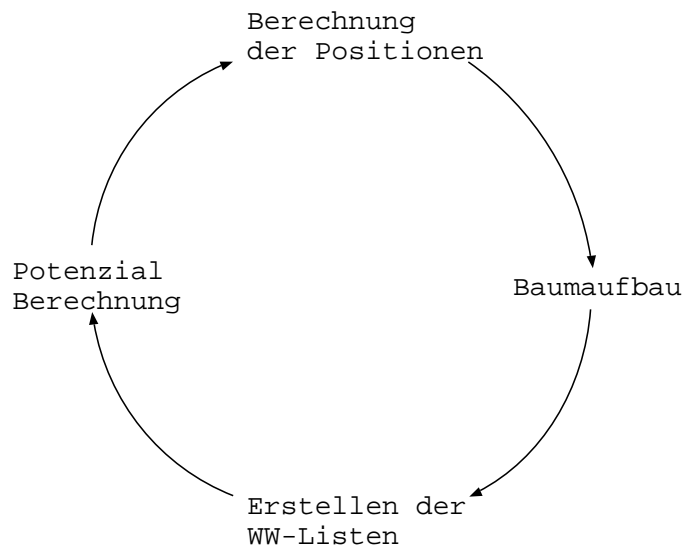


Abbildung 3.8: Barnes-Hut Algorithmus

Ausgehend von oben genannter Startverteilung wird in Schritt eins der Baum, bestehend aus den Multipolen, aufgebaut. Im zweiten Schritt wird zu jedem einzelnen Teilchen eine Wechselwirkungsliste erstellt. Die Zusammensetzung dieser Wechselwirkungslisten wird mit Hilfe eines Multipol Akzeptanzkriteriums (MAC), siehe Kapitel 4, bestimmt. Erfüllt ein Multipol die Anforderung des MAC, wird dieser in die Liste aufgenommen und trägt zur Potenzialberechnung bei. Ist dies nicht der Fall, so wird der Multipol in seine Teilmultipole aufgeteilt. Diese werden ebenfalls anhand des MAC überprüft und gegebenenfalls in die Wechselwirkungsliste aufgenommen. Existiert nun zu jedem Teilchen eine solche Liste der Multipole, werden im dritten Schritt die Kräfte durch Summation der Multipolkräfte für jedes Teilchen berechnet. Im vierten und letzten Schritt werden die Positionen und die Geschwindigkeiten der Teilchen aktualisiert. Sind diese vier Schritte ausgeführt, so kann auf der Basis der erneuerten Teilcheninformationen mit Schritt eins fortgefahren werden. Ein Durchlauf dieser vier Schritte entspricht der Simulation eines Zeitschritts.

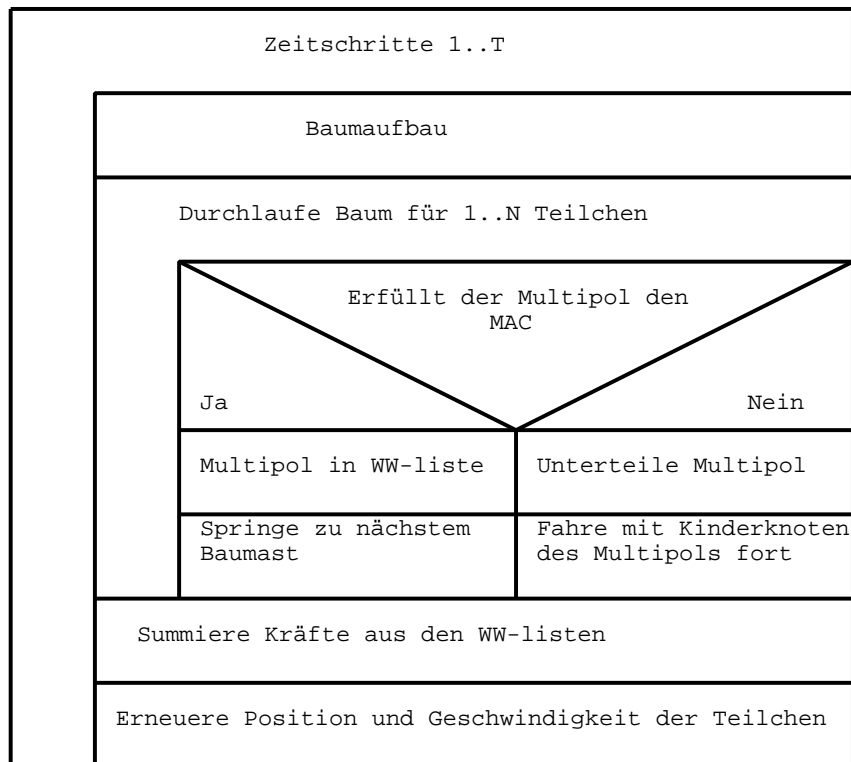


Abbildung 3.9: Verlaufsdiagramm zum Barnes-Hut Baumalgorithmus

3.8 Implementierung in PEPC

Der oben beschriebene Barnes-Hut Baumalgorithmus wurde im Forschungszentrum Jülich in einem Programm namens **PEPC** (**P**retty **E**fficient **P**arallel **C**oulomb-solver) implementiert. PEPC ist ein Teil der FCS Bibliothek, die unter anderem noch Implementierungen der Ewald-Summation, der FMM und der direkten Summation (exakten Berechnung) beinhaltet. Dem Benutzer stehen drei verschiedene Anwendungen von PEPC zur Verfügung. PEPC-E wurde zur Simulation von Molekular-Dynamik-Problemen entwickelt, PEPC-B dient der Simulation von Plasmawechselwirkung. Diese beiden Versionen wurden bereits veröffentlicht. Eine dritte Variante, PEGS, ist eine nicht öffentliche Anwendung, die zur Simulation von astrophysikalischen Gravitations-Problemen verwendet wird. Wie bereits im Namen des Programms vermerkt, wurde PEPC für parallele Rechnerarchitekturen realisiert. In Jülich sind das hauptsächlich JUMP (**J**Uelich **M**ulti**P**rocessor), ein IBM p690 cluster 1600, und JUBL (**J**Uelich **B**lueGene/**L**), ein IBM BlueGene/L System. Die parallele Implementierung basiert ausschließlich auf dem MPI-Standard (**M**essage **P**assing **I**nterface).

Kapitel 4

Multipol-Akzeptanz Kriterium / MAC

4.1 Was ist ein MAC?

MAC ist eine aus dem Englischen stammende Abkürzung und bedeutet **M**ultipole **A**cceptance **C**riterion. Bei der Erstellung der oben genannten Wechselwirkungslisten bietet ein MAC die Möglichkeit zu entscheiden, ob ein Multipol zur Kräfte- bzw. Potenzialberechnung beiträgt. Je geschickter der MAC die Wechselwirkungslisten besetzt, desto effizienter arbeitet das Programm. Bei geeigneter Wahl der Multipole erreicht die Rechnung bei geringem Aufwand eine maximale Genauigkeit.

Erfüllt ein Multipol die Anforderungen des MAC, so wird dieser in die Wechselwirkungsliste des jeweiligen Teilchens aufgenommen. Tritt der Fall ein, dass ein Multipol eine nicht ausreichend genaue Approximation der Kräfte bzw. Potenziale liefert, also den MAC nicht erfüllt, wird dieser Multipol in seine Teilmultipole unterteilt. Um den Rechenaufwand, der durch den MAC auftritt, möglichst gering zu halten, ist man daran interessiert, einfache Regeln zur Überprüfung eines Multipols zu finden.

Es existieren zwei verschiedene Arten von MACs. Auf der einen Seite die rein geometrisch gesteuerten MACs, auf der anderen Seite die auf physikalisch motivierter Abschätzung basierenden MACs. Bei letzteren geht man davon aus, dass sich das elektrische Feld E eines Teilchens innerhalb eines Zeitschritts nicht entscheidend verändert, das heißt, dass die Änderung des elektrischen Felds ΔE

gering ausfällt. Über einen Parameter α kann der Benutzer angeben, in welcher Größenordnung diese Abweichung liegen darf. Mit Hilfe der Taylorentwicklung für die Funktion des elektrischen Felds gelangt man so zu einem Akzeptanzkriterium für die Multipole.

Die rein geometrisch gesteuerten MACs lassen sich hinsichtlich der Genauigkeit der Berechnung durch einen Parameter θ steuern. Die exakte Bedeutung von θ variiert bei den jeweiligen MACs. Grob gesprochen regelt θ das Verhältnis der Größe des Multipols zu der Entfernung des Teilchens zum Multipol. Den Wert für θ kann der Benutzer einstellen. Je kleiner θ gewählt wird, desto genauer wird die Berechnung und desto größer wird die benötigte Rechenzeit. Umgekehrt sinkt bei hohen θ -Werten die Rechendauer und der Rechenfehler steigt. Gebräuchliche bzw. sinnvolle θ -Werte liegen bei $0.3 \leq \theta \leq 0.7$. Bei einem θ -Wert von 0 findet keine Approximation der Kräfte bzw. Potenziale statt, die Rechnung entspricht der „direkten Summation“ und ist somit im Rahmen der Rechengenauigkeit exakt.

Drei θ -gesteuerte MACs wurden in PEPC implementiert, der **Barnes-Hut MAC**, der **Minimum Distance MAC** (MD MAC) und der B_{max} -MAC. Die beiden letztgenannten Kriterien weisen gegenüber Barnes-Hut einen entscheidenden Vorteil auf. Betrachtet man eine Geometrie, die durch starke Häufungen an positiven Teilchen dominiert wird, können Konstellationen auftreten, in denen Barnes-Hut eine verherend schlechte Näherung der Kräfte bzw. Potenziale liefert. Diese Schwäche soll durch den MD MAC und den B_{max} MAC behoben werden [3]. Ob sich dieser Vorteil gegenüber Barnes-Hut ebenfalls bei einer verklumpten Verteilung aus negativen und positiven Teilchen auswirkt, wird in Kapitel 5 explizit getestet.

Auf der Basis von Abschätzungen der Multipole wird zur Verbesserung der Recheneffizienz zusätzlich eine Erweiterung von b_{max} hergeleitet und implementiert.

4.2 Barnes-Hut MAC

Der in PEPC bereits vorhandene **Barnes-Hut MAC** (BH MAC) berechnet das Verhältnis der Boxenlänge s des Multipols M zum Abstand d des Teilchens P vom Multipol. Liegt dieses Verhältnis unterhalb des vorgegebenen θ , gilt also $\frac{s}{d} \leq \theta$, wird der Multipol M in die Wechselwirkungsliste aufgenommen. Andernfalls wird der Knotenbaum weiter verfeinert.

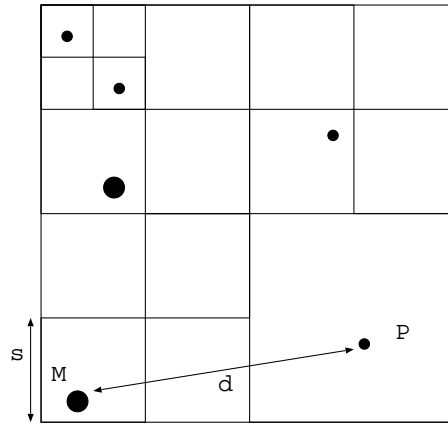


Abbildung 4.1: Barnes-Hut MAC

4.3 Minimum Distance MAC

Der erste neu implementierte MAC ist der **Minimum Distance MAC**. Damit der Multipol M diesem MAC genügt, muss das Verhältnis von seiner Boxenlänge s zum kürzesten Abstand des Teilchens P zur Box d_{min} kleiner als das gegebene θ sein. Das heißt die Bedingung $\frac{s}{d_{min}} \leq \theta$ muss erfüllt sein.

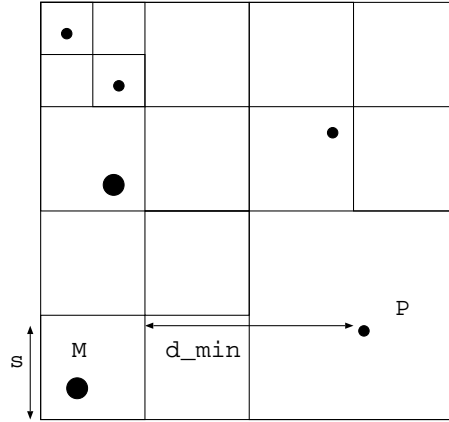


Abbildung 4.2: Minimum Distance MAC

4.3.1 Implementierung MD MAC

Zur Berechnung des kürzesten Abstands eines Teilchens P zu der Box eines Multipols M , wie in Abbildung 4.3 dargestellt, werden zunächst die Abstände

$$\begin{aligned}
 d_{x1} &= x_{min} - x_P \quad , \quad d_{x2} = x_P - x_{max} \\
 d_{y1} &= y_{min} - y_P \quad , \quad d_{y2} = y_P - y_{max} \\
 d_{z1} &= z_{min} - z_P \quad , \quad d_{z2} = z_P - z_{max}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

berechnet.

Die Maximumsbildung

$$\begin{aligned}
 d_x &= \max(d_{x1}, d_{x2}, 0) \\
 d_y &= \max(d_{y1}, d_{y2}, 0) \\
 d_z &= \max(d_{z1}, d_{z2}, 0)
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

liefert die Lage des Teilchens. Mit $d_{min} = \sqrt{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2}$ erhält man den kürzesten Abstand des Teilchens zur Box. Anhand des zweidimensionalen Beispiels in Abbildung 4.3 soll dieser Rechenalgorithmus nochmals detailliert erläutert werden.

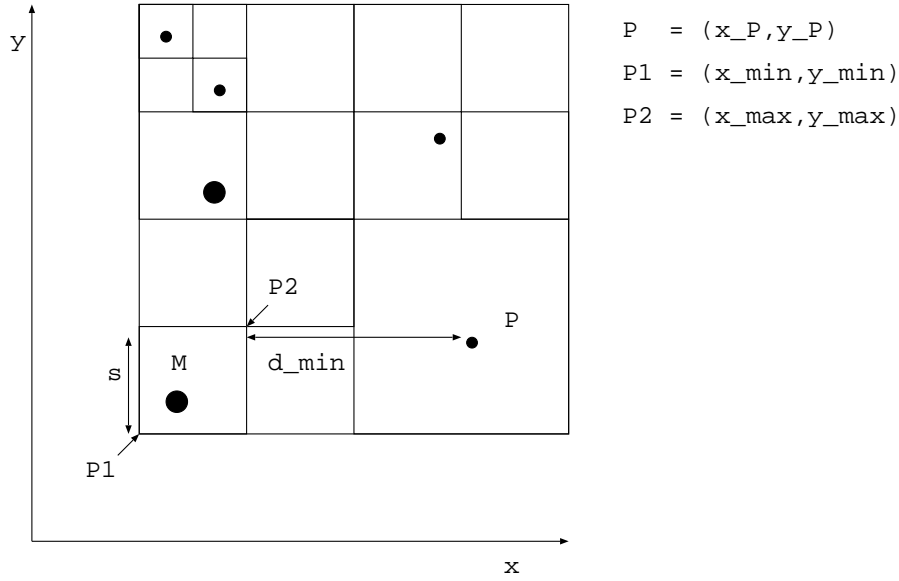
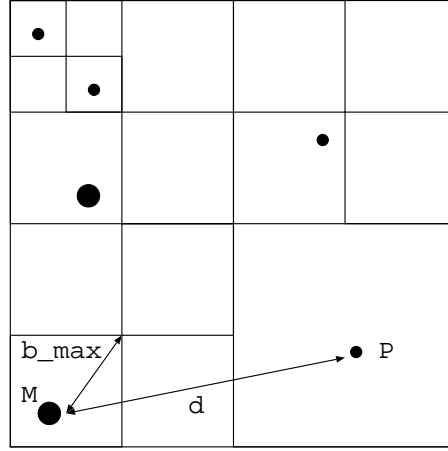


Abbildung 4.3: Implementierung MD MAC

Zu bestimmen ist der minimale Abstand des Teilchens P zur Box des Multipoles M . Dabei ergibt sich $d_{x1} = x_{min} - x_P < 0$ und $d_{x2} = x_P - x_{max} > 0$, sowie $d_{y1} = y_{min} - y_P < 0$ und $d_{y2} = y_P - y_{max} < 0$. Als Ergebnis der Maximabbildung dieser Abstände mit der 0, erhält man $d_x = d_{x2}$ bzw. $d_y = 0$. Wie schon in Abbildung 4.3 ersichtlich, wird keine y-Komponente zur Minimalabstandsrechnung benötigt. Dies bedeutet, dass sich als kleinster Abstand des Teilchens zur Box $d_{min} = \sqrt{d_{x2}^2} = |d_{x2}|$ ergibt.

4.4 B_{max} MAC

Der zweite neu implementierte MAC wird als B_{max} -**MAC** bezeichnet. Dieser MAC setzt den größtmöglichen Abstand b_{max} des Multipoles M zu einem Punkt seiner Box in Relation zu dem Abstand des Multipoles zum Teilchen d . Gilt also $\frac{b_{max}}{d} \leq \theta$, so wird der Multipol in die Wechselwirkungsliste des Teilchens P aufgenommen.

Abbildung 4.4: B_{max} MAC

4.5 Erweiterung B_{max} MAC

In [4] wird eine Erweiterung zum B_{max} MAC hergeleitet. Es wird ein kritischer Radius r_c um das Ladungszentrum jedes Multipoles definiert. Bei der Erstellung der Wechselwirkungsliste der Teilchen wird geprüft, ob sich das Teilchen außerhalb des kritischen Radius befindet. Nur dann wird der Multipol akzeptiert.

Über eine Fehlerabschätzung der Taylorreihe (3.7) erhält man bei einer Entwicklung bis zu den Dipolmomenten die Bedingung:

$$|\Delta\Phi| \leq \frac{1}{(R - b_{max})^2} \left(\frac{3B_2}{R^2} - \frac{2B_3}{R^3} \right), \quad (4.3)$$

wobei R der Abstand zwischen Teilchen und Multipol und B_2 bzw. B_3 obere Schranken für den Quadrupol bzw. Oktopol sind. Mit einer selbst definierten Fehlerschranke $\epsilon_{max} > 0$, die nicht überschritten werden soll ($|\Delta\Phi| \leq \epsilon_{max}$), und durch Weglassen des Subtraktionsterms $\frac{2B_3}{R^3}$ gelangt man zu:

$$\epsilon_{max} \leq \frac{1}{(R - b_{max})^2} \frac{3B_2}{R^2} \quad (4.4)$$

Um aus dieser Bedingung einen MAC definieren zu können, wird unter der Bedingung, dass der Abstand von Teilchen zum Multipol größer als b_{max} sein muss ($R - b_{max} > 0$), (4.4) nach R aufgelöst:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{max} &\leq \frac{1}{(R - b_{max})^2} \frac{3B_2}{R^2} \\
R^2(R - b_{max})^2 &\leq \frac{3B_2}{\epsilon_{max}} \\
R(R - b_{max}) &\leq \sqrt{\frac{3B_2}{\epsilon_{max}}} \\
R^2 - R \cdot b_{max} + \left(\frac{b_{max}}{2}\right)^2 &\leq \sqrt{\frac{3B_2}{\epsilon_{max}}} + \left(\frac{b_{max}}{2}\right)^2 \\
\left(R - \frac{b_{max}}{2}\right)^2 &\leq \sqrt{\frac{B_2}{\epsilon_{max}}} + \frac{b_{max}^2}{4} \\
R &\leq \frac{b_{max}}{2} + \sqrt{\sqrt{\frac{B_2}{\epsilon_{max}}} + \frac{b_{max}^2}{4}} \tag{4.5}
\end{aligned}$$

In [4] wird für B_2 als obere Schranke $\sum_{i=1}^n |q_i| \cdot b_{max}^2$ angegeben. Setzt man in (4.5) die Bedingung $B_2 \leq \sum_{i=1}^n |q_i| \cdot b_{max}^2$ ein, ergibt sich letztlich:

$$R \leq \frac{b_{max}}{2} + \sqrt{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n |q_i| \cdot b_{max}^2}{\epsilon_{max}}} + \frac{b_{max}^2}{4}} \tag{4.6}$$

Diese Abschätzung gibt bei gegebener Fehlerschranke ϵ_{max} eine obere Schranke für den Abstand eines Teilchens zu einem Multipol an. Als kritischen Radius definiert man genau diese Schranke des Abstands:

$$r_c = \frac{b_{max}}{2} + \sqrt{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n |q_i| \cdot b_{max}^2}{\epsilon_{max}}} + \frac{b_{max}^2}{4}} \tag{4.7}$$

Als MAC wird schließlich folgende Bedingung abgeprüft:

$$r_c < R_{Multi} \tag{4.8}$$

Befindet sich also das Teilchen außerhalb des kritischen Radius des Multipols ($r_c < R_{Multi}$), so wird dieser in die Wechselwirkungsliste des Teilchens aufgenommen.

4.6 E-Feld MAC

Die grundlegende Idee dieses MACs basiert auf der Annahme, dass sich das elektrische Feld eines Multipols bzw. eines Teilchens innerhalb eines Zeitschritts (von n auf $n+1$) nur geringfügig ändert.

Durch eine Abschätzung der Taylorreihenentwicklung der Potenzialfunktion $\Phi(\vec{R})$ erhält man die Größenordnung des Fehlers eines Multipols. Die eigentliche Absicht dieses MACs besteht darin, dass die Summe dieser Fehler nur einen geringen Prozentsatz des gesamten elektrischen Felds ausmacht. Um die Akzeptanz eines einzelnen Multipolbeitrags bestimmen zu können, definiert man diese Bedingung um. Als MAC wird nicht die prozentuale Abweichung der Summe aller Multipolfehler vom gesamten elektrischen Feld genommen, sondern die prozentuale Abweichung des einzelnen Multipols vom elektrischen Feld des aktuell betrachteten Teilchens. Über einen selbst definierten Parameter α kann der Benutzer steuern, wie groß der Fehler des Multipols sein darf:

$$\Delta E_{Multi} < \alpha |E_{n+1}^T| \quad (4.9)$$

Gibt man beispielsweise einen Wert von $\alpha = 0.01$ an, so darf der Fehler des Multipols 1 % des elektrischen Felds des Teilchens ausmachen. In [2] wird dieser MAC mit Hilfe einer Abschätzung über die Beschleunigung für Massensysteme hergeleitet. Um ein Abbruchkriterium für Ladungssysteme aufstellen zu können, muss zunächst eine Äquivalenz zwischen Massen und Ladungen hergestellt werden. Die physikalische Größe Kraft wird bei Massen als Produkt aus Masse und Beschleunigung $F = m \cdot a$ definiert. Betrachtet man die Kraft, die in Ladungssystemen herrscht, verwendet man $F = q \cdot E$, also das Produkt aus Ladung und elektrischem Feld. Aus diesen unterschiedlichen Definitionen ergibt sich die Äquivalenz von Beschleunigung in Massensystemen zu elektrischem Feld in Ladungssystemen. Der in [2] hergeleitete MAC kann also unter Verwendung des elektrischen Felds auf Ladungen angewendet werden.

Um ein möglichst einfach zu implementierendes Abbruchkriterium zu erhalten, wird in [2] die approximierte Potenzialfunktion (3.7) vereinfacht. Wichtig bei der Herleitung dieses MACs ist eine Größenordnung des Fehlers anzunähern, daher wird $\Phi(\vec{R})$ zunächst zu:

$$\Phi(\vec{R}) \approx - \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\sum_{i=0}^n q_i \cdot |r_i|^j}{|\vec{R}|^{j+1}} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} &\approx - \left(\sum_{i=1}^n q_i \frac{1}{|\vec{R}|} + \sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i| \frac{1}{|\vec{R}|^2} + \sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i|^2 \frac{1}{|\vec{R}|^3} \right) \\ &+ O \left(\sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i|^3 \frac{1}{|\vec{R}|^4} \right) \end{aligned} \quad (4.11)$$

umgeschrieben. Dabei werden für die Monopolterme die x_i, y_i, z_i zu $|r_i| = \sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}$ zusammengefasst und die x, y, z werden mit $\frac{1}{|\vec{R}|^3}$ zu $\frac{1}{|\vec{R}|^2}$ abgeschätzt. In gleicher Weise werden die anderen Multipolterme in die kompakte Schreibweise (4.10) überführt. Zwar beschreibt diese vereinfachte Formel nicht exakt die Taylorentwicklung der Potenzialfunktion $\Phi(\vec{R})$, dennoch bleibt die Größenordnung der einzelnen Summanden erhalten. Mit Hilfe des physikalischen Zusammenhangs:

$$E(\vec{R}) = -\nabla\Phi(\vec{R}) \quad (4.12)$$

erhält man eine approximierte Formel des elektrischen Felds. Aufgrund der Tatsache, dass $\vec{R} \in \mathbb{R}^3$, folgt, dass auch $E(\vec{R}) \in \mathbb{R}^3$. Die Fehlerabschätzung, die für diesen MAC hergeleitet werden soll, wird lediglich von der Länge von \vec{R} , also $|\vec{R}|$, abhängig gemacht. Die Ableitungen in x-, y-, z-Richtung werden nicht einzeln berücksichtigt, so dass die Funktion $E(\vec{R})$ als eindimensionale Funktion $E(|\vec{R}|) \in \mathbb{R}$ aufgefasst werden kann. Man erhält aus (4.12) und (4.10):

$$\begin{aligned} E(|\vec{R}|) &= -\Phi'(|\vec{R}|) \\ &\approx -\sum_{j=0}^{\infty} (j+1) \frac{\sum_{i=0}^n q_i \cdot |r_i|^j}{|\vec{R}|^{j+2}} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Lässt man die Faktoren $(j+1)$, die bei Bildung der Ableitung entstehen, weg, so ergibt sich als genäherte Formel des elektrischen Felds folgende:

$$\begin{aligned} E_{Multi}(|\vec{R}|) &\approx -\left(\sum_{i=1}^n q_i \frac{1}{|\vec{R}|^2} + \sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i| \frac{1}{|\vec{R}|^3} + \sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i|^2 \frac{1}{|\vec{R}|^4} \right) \\ &+ O\left(\sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i|^3 \frac{1}{|\vec{R}|^5} \right) \end{aligned} \quad (4.14)$$

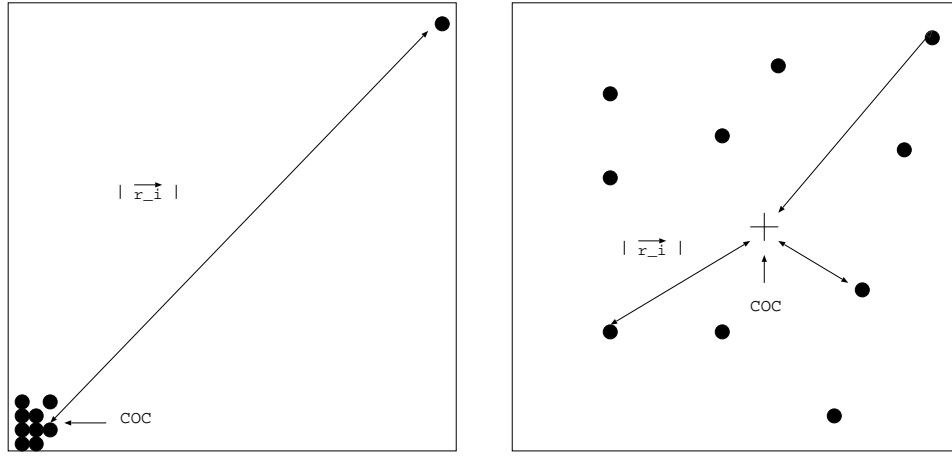
Der bei dieser Approximation auftretende Fehler ΔE_{Multi} liegt also in der Größenordnung, vgl. Formel (3.7), von:

$$O\left(\sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i|^3 \frac{1}{|\vec{R}|^5} \right) \quad (4.15)$$

Zur zusätzlichen Vereinfachung dieser Formel wird die Summe $\sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i|^3$ durch $Q_{ges} L_{Box}^3$ ersetzt, wobei L_{Box} die Seitenlänge der Box, in der sich der Multipol befindet, und $Q_{ges} = \sum_{i=1}^n |q_i|$ die Summe der Beträge der Ladungen des Multipoles bezeichnet. Es gilt stets:

$$\sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i|^3 \lesssim \sum_{i=1}^n q_i \cdot L_{Box}^3, \quad (4.16)$$

mit $|r_i| \lesssim L_{Box}$. Möchte man dieser Stelle eine exakte Abschätzung für den Abstand der einzelnen Teilchen zum Ladungsmittelpunkt des Multipoles $|r_i|$, so müsste man den größtmöglichen Abstand zweier Punkte in einer Box betrachten. Im Dreidimensionalen entspricht diesem Abstand die Länge der Raumdiagonalen in einem Würfel. Bezeichnet man mit L_{Box} die Kantenlänge des Würfels, so ergibt sich $L_{Diag} = \sqrt{3}L_{Box}$. Es gilt also $|r_i| \leq L_{Diag}$. Eine solch scharfe Abschätzung wird hier jedoch nicht vorgenommen. Geht man in der Praxis davon aus, dass sich die Teilchen innerhalb einer Box homogen verteilen, es treten also keine Häufungen der Teilchen in einer Ecke der Box auf, so reicht die Abschätzung $|r_i| \lesssim L_{Box}$ aus.



COC = Ladungszentrum des Multipoles

$|\vec{r}_i|$ = Abstände der Teilchen zum Ladungszentrum

Abbildung 4.5: Inhomogene und homogene Teilchenverteilung innerhalb einer Box

Aufgrund der Tatsache, dass die einzelnen Ladungen in neutralen Systemen unterschiedliche Vorzeichen besitzen, gilt zusätzlich:

$$\sum_{i=1}^n q_i \cdot L_{Box}^3 \leq \sum_{i=1}^n |q_i| \cdot L_{Box}^3 \quad (4.17)$$

In Systemen, in denen ausschließlich positive Ladungen auftreten, gilt die Gleichheit zwischen der Summe der Beträge der Ladungen und dem Betrag der Summe der Ladungen $\sum_{i=1}^n |q_i| = |\sum_{i=1}^n q_i|$. Schließlich ergibt sich folgende Abschätzung:

$$\sum_{i=1}^n q_i \cdot |r_i|^3 \lesssim Q_{ges} \cdot L_{Box}^3, \quad (4.18)$$

wobei $Q_{ges} = \sum_{i=1}^n |q_i|$. Zusammen mit (4.15) kann eine obere Schranke für den Approximationsfehler gefunden werden:

$$\Delta E_{Multi} \lesssim \frac{Q_{ges} \cdot L_{Box}}{|\vec{R}|^5} \quad (4.19)$$

Zusammen mit (4.9) wird als E-Feld MAC zunächst folgende Bedingung definiert:

$$\frac{Q_{ges} \cdot L_{Box}^3}{|\vec{R}|^5} \leq \alpha \cdot |E_{n+1}^T| \quad (4.20)$$

Das elektrische Feld des Teilchens im Schritt $n + 1$ ist zum Zeitpunkt der Erstellung der Wechselwirkungslisten nicht bekannt. Aufgrund der Annahme, dass sich das elektrische Feld eines Teilchens innerhalb eines Zeitschritts nur geringfügig ändert, verwendet man für den MAC das elektrische Feld aus dem Schritt n . Man setzt also $E_n^T = E_{n+1}^T$ in (4.20) ein und erhält somit folgende Bedingung als E-Feld MAC:

$$\frac{Q_{ges} \cdot L_{Box}^3}{|\vec{R}|^5} \leq \alpha \cdot |E_n^T| \quad (4.21)$$

Das bedeutet, falls der Quotient $\frac{Q_{ges} \cdot L_{Box}^3}{|\vec{R}|^5}$ kleiner oder gleich $\alpha \cdot |E_n^T|$ ist, wird der Multipol in die Wechselwirkungsliste des aktuell betrachteten Teilchens aufgenommen.

Kapitel 5

Vergleich der MACs

5.1 Verhalten der θ -gesteuerten MACs bei mehrfach verklumpter Verteilung

Bei Ladungsverteilungen, die durch Häufungen von Teilchen dominiert werden, können beim Barnes-Hut MAC bei großen θ -Werten Situationen auftreten, bei denen die Fehler der Potenziale bzw. Kräfte so groß werden, dass die Simulation ihre physikalische Aussagekraft verliert [3]. In Abbildung 5.1 wird eine solche Situation aufgezeigt. Die beiden Teilchenhäufungen liegen in etwa $d \approx \sqrt{3}$ mal Seitenlänge von Box 10 auseinander. Das Ladungszentrum liegt, aufgrund der ungleichen Verteilung innerhalb der Box, in der linken unteren Ecke. Wird nun die Wechselwirkungsliste eines Teilchens, das sich außerhalb von Box 10 befindet, berechnet, kann der Fall auftreten, dass der Quotient $\frac{s}{d} \approx \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.577$ ist. Somit würde der Multipol aus Box 10 für $\theta \geq 0.6$ in die Wechselwirkungsliste des Teilchens aufgenommen werden. Aufgrund der Teilchen, die sich zwar innerhalb der Box, jedoch weit entfernt vom Ladungszentrum befinden, erzeugt die Akzeptanz dieses Multipols einen inakzeptablen Fehler bei der Potenzial- bzw. Kraftberechnung. Aufgrund des großen Abstands dieser Teilchen zum Ladungszentrum des Multipols wird die durch Formel (3.7) erzielte Approximation unbrauchbar.

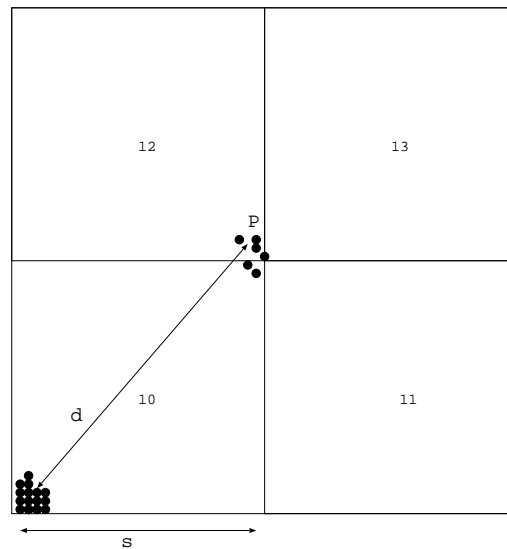


Abbildung 5.1: Problem Barnes-Hut erstes Beispiel

Diese Problematik des Barnes-Hut MAC soll nach [3] durch die Verwendung des MD MAC bzw. des B_{max} MAC für Massenverteilungen behoben werden. Hier wird diese Aussage für verschiedene Ladungsverteilungen näher untersucht.

Betrachtet man, wie in Abbildung 5.2 dargestellt, eine dreifach verklumpte Ladungsverteilung, deren Zentren sich an den äußersten Ecken und in der Mitte der Simulationsbox befinden, so wird eine weitere Schwäche des Barnes-Hut MAC deutlich.

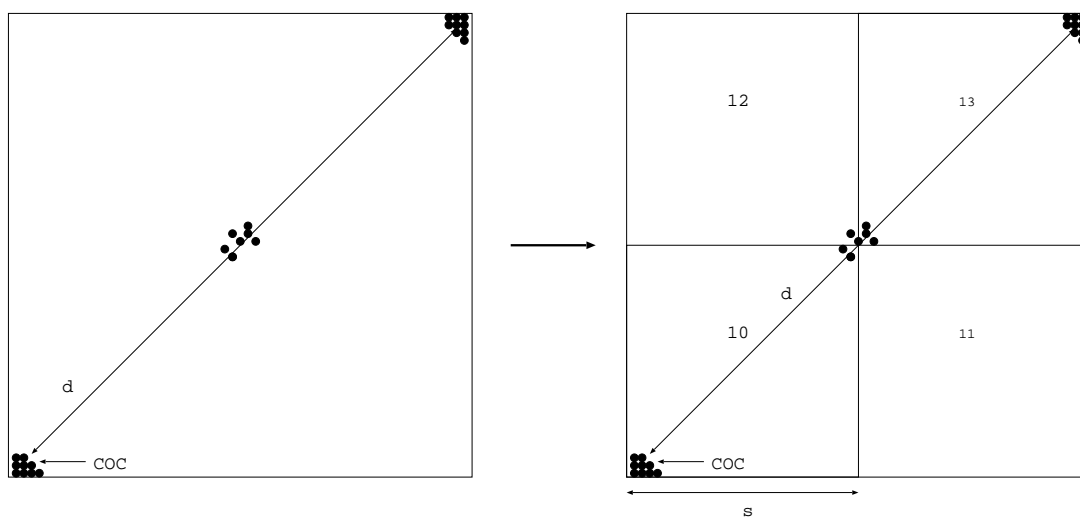


Abbildung 5.2: Problem Barnes-Hut zweites Beispiel

Führt man, wie in Abbildung 5.2 gezeigt wird, die erste Stufe der Gebietsaufteilung durch, so erkennt man, dass die beiden äußeren Ladungszentren ca. $2 \cdot \sqrt{3} \cdot s$ auseinanderliegen. Ähnlich zu oben auftretender Problematik wird für Teilchen in der rechten oberen Ecke und der linken unteren Ecke der Multipol aus Box 10 bzw. 13 für θ -Werte bis 0.3 ($\frac{1}{2\sqrt{3}} \approx 0.29$) akzeptiert.

5.1.1 Test mit rein positiver Ladungsverteilung

In einer Versuchsreihe wurden die relativen Fehler, s. Formel (5.1), der drei θ -gesteuerten MACs, mit $\theta = 0.7$, einer zweifach gehäuft (verklumpten) Verteilung, s. Abb. 5.1, mit 1000 positiven Teilchen berechnet.

$$f_{rel} = \frac{|\Phi_{MAC} - \Phi_{exakt}|}{|\Phi_{exakt}|} \quad (5.1)$$

Das Simulationsgebiet ist ein Würfel mit Kantenlänge 1 und Mittelpunkt (0.5,0.5,0.5). Die Aufteilung innerhalb des Gebiets wurde so gewählt, dass sich die ersten 200 Teilchen um den Mittelpunkt und die restlichen 800 Teilchen in der linken unteren Ecke des Würfels ($x_p + y_p + z_p < 0.01$) befinden. Der Multipol, durch den eine oben beschriebene Situation auftreten kann, befindet sich somit in der Box mit den Diagonaleckpunkten (0,0,0) und (0.5,0.5,0.5). Akzeptiert ein MAC bei Teilchen außerhalb der Box diesen Multipol, sind große Fehler in den Kräften bzw. Potenzialen dieser Teilchen zu erwarten. Für eine Verteilung aus rein positiven Ladungsträgern sind die relativen Fehler für die drei MACs aufgetragen. Bei Barnes-Hut zeigt sich, dass sich eine Vielzahl der Ausreißer (Fehler > 0.6) unter den ersten 200 Teilchen befindet, vergleiche Abb. 5.3. Die beiden anderen MACs weisen diese Tendenz nicht auf. Unter Verwendung des MD MAC lassen sich Ausreißer fast gänzlich vermeiden, s. Abb. 5.4. Bildet man den Mittelwert der relativen Fehler, so ergibt sich für Barnes-Hut ein Wert von $3.71 \cdot 10^{-2}$, für MD $9.08 \cdot 10^{-3}$ und für B_{max} $4.27 \cdot 10^{-2}$. Diese Durchschnittswerte der relativen Fehler spiegeln oben aufgezeigte Tendenz wider. Der MD MAC bietet für diese Konfiguration die besten Approximationseigenschaften.

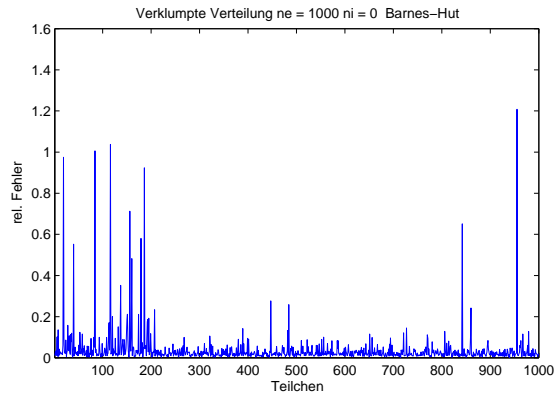


Abbildung 5.3: Verklumpte Verteilung Barnes-Hut positiv

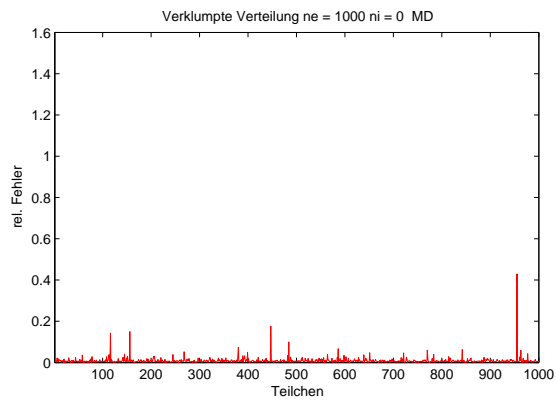


Abbildung 5.4: Verklumpte Verteilung MD positiv

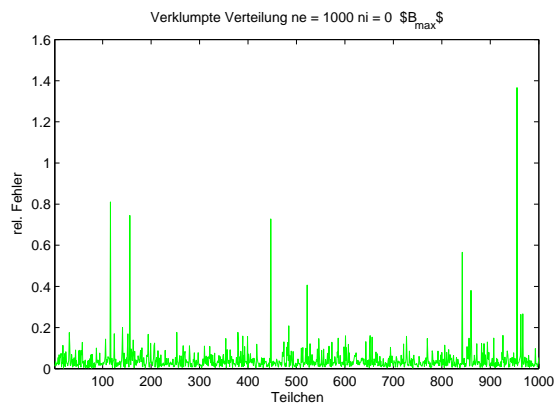


Abbildung 5.5: Verklumpte Verteilung B_{max} positiv

5.1.2 Test mit positiver und negativer Ladungsverteilung

Die oben beschriebene zweifach verklumpte Teilchenverteilung wurde zusätzlich für eine gemischte Verteilung mit 500 positiven und 500 negativen Teilchen durchgeführt. Die signifikante Häufung der Ausreißer unter den ersten 200 Teilchen spiegelt sich für Barnes-Hut nicht so deutlich wider wie bei der rein positiven Ladungsverteilung. Insgesamt kommt es bei Barnes-Hut und B_{max} für alle Teilchen zu einer größeren Anzahl an Ausreißern, s. Abb. 5.6 und Abb. 5.8. Wie man in Abbildung 5.7 erkennen kann, zeigt sich als exaktester und bestgeeignester MAC auch hier der MD MAC. Die Größe der Fehler liegt deutlich unterhalb der der beiden anderen MACs, Ausreißer lässt der MD MAC keine zu. Diese Aussage wird zusätzlich durch die Durchschnittswerte der aufgetragenen relativen Fehler gestützt. Barnes-Hut erreicht einen Wert von $8.05 \cdot 10^{-2}$, MD $2.39 \cdot 10^{-2}$ und B_{max} $7.15 \cdot 10^{-2}$.

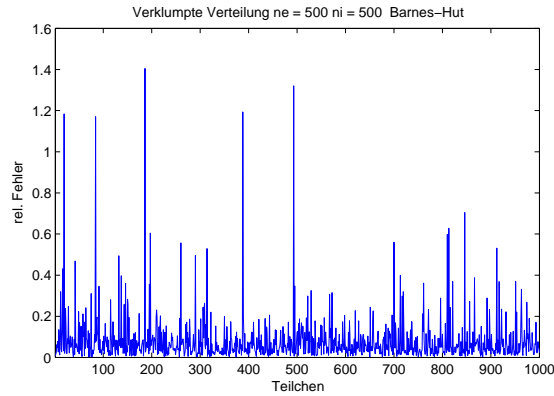


Abbildung 5.6: Verklumpte Verteilung Barnes-Hut neutral

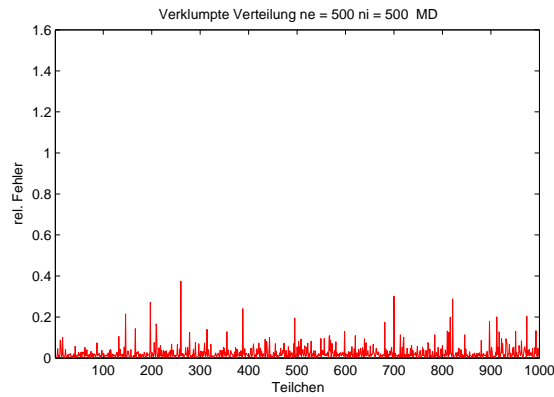
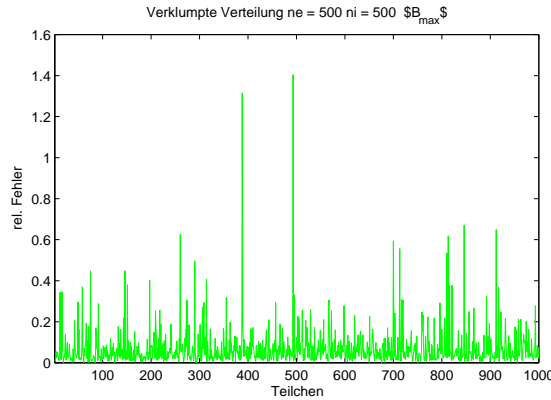


Abbildung 5.7: Verklumpte Verteilung MD neutral

Abbildung 5.8: Verklumpte Verteilung B_{max} neutral

5.1.3 Zusammenfassung verklumpte Verteilungen

Die in [3] aufgestellte These, dass durch die Verwendung des MD MAC und des B_{max} MAC die aufgezeigte Schwäche des Barnes-Hut MAC bei mehrfach verklumpten Verteilungen behoben werden kann, trifft bei den in dieser Arbeit aufgezeigten Tests nur für den MD MAC zu. Dieser zeigt sich sowohl im rein positiven als auch im neutralen System als bestes Approximationskriterium. Der B_{max} MAC lässt zwar keine signifikante Häufung von Ausreißern bei den ersten 200 Teilchen zu, jedoch weisen sowohl die durchschnittliche Größe der relativen Fehler als auch die Abbildungen 5.5 und 5.8 darauf hin, dass B_{max} die Approximation bei verklumpten Verteilungen gegenüber Barnes-Hut nicht entscheidend verbessert.

Für die Praxis bedeuten diese Ergebnisse, dass bei zweifach verklumpten Ladungsverteilungen die Verwendung des B_{max} MAC und des Barnes-Hut MAC bei θ Werten über 0.6 nicht geeignet ist. Bei drei- oder mehrfach verklumpten Ladungsverteilungen können unter Verwendung von Barnes-Hut bei $\theta \geq 0.3$ Probleme bei der Approximationsgenauigkeit auftreten. In beiden Fällen empfiehlt sich als Akzeptanzkriterium der MD MAC.

5.2 Effizienztests

Im folgenden werden die neu implementierten MACs mit dem Barnes-Hut MAC hinsichtlich ihrer Recheneffizienz getestet und verglichen. Für verschiedene Teilchenverteilungen wird systematisch überprüft, bei welchem MAC das Verhältnis von Rechengenauigkeit zu Rechenaufwand am besten ist. Ein MAC mit der, im Vergleich zu den anderen MACs, höchsten Recheneffizienz benötigt für eine gegebene Genauigkeit den geringsten Aufwand.

5.2.1 Beschreibung der Testreihe

In einer Testreihe wurden zunächst die drei θ -gesteuerten MACs hinsichtlich ihrer Recheneffizienz untersucht. Die Konfiguration von PEPC war während der Tests identisch, lediglich der Wert für θ wurde geändert. Für die Vergleichsreihe wurde ein System aus insgesamt 5000 Teilchen verwendet, von denen 2500 positiv ($q_i = 1$), bezeichnet mit „ne“, und 2500 negativ ($q_i = -1$), bezeichnet mit „ni“, geladen waren. Die Ladung des Gesamtsystems war also neutral $\sum_{i=1}^{5000} q_i = 0$. Aufgeteilt wurden die Teilchen in einer Kugel mit Radius 0.5 und Mittelpunkt (0.5,0.5,0.5). Die Verteilung wurde zufällig gewählt. Der verwendete Zufallszahlengenerator ist die C-Funktion *rand()* bzw. *srand()*. In Abbildung 5.9 wurden die empirischen Verteilungsfunktionen der relativen Fehler der einzelnen MACs aufgetragen. Es wurde jeder MAC mit θ -Werten von 0.3, 0.5 und 0.7 getestet. Als Referenzwert wurde die exakte Summation (also eine Summation, die ohne Approximation durch Multipole arbeitet) verwendet.

Die Tests wurden auf einem Knoten des JUMP (seriell) durchgeführt.

5.2.2 Erstellung der empirischen Verteilungsfunktionen

Zunächst wurden die relativen Fehler der Potenziale aller 5000 Teilchen nach obiger Formel berechnet. Um eine prozentuale Aussage über die Verteilung der Fehler machen zu können, wurde der mögliche Fehlerbereich 10^{-6} bis 10^0 in äquidistante Teilintervalle unterteilt. Je mehr Teilintervalle gewählt werden (also je kleiner das einzelne Teilintervall ist), desto „glatter“ ist der Verlauf der Fehlerverteilungen. Zur Erstellung von Abbildung 5.9 wurden 10^5 Teilintervalle gewählt.

Die Anzahl der Teilchen, deren relativer Fehler in einem Teilintervall liegt, wurde aufsummiert und dem jeweiligen Intervall zugeordnet. Vom kleinsten Intervall ausgehend wurde die Anzahl der Fehler der einzelnen Intervalle ebenfalls addiert, so dass man eine Aussage treffen kann, wie viele Fehler kleiner sind als ein gegebener Wert. Folgendes Beispiel verdeutlicht die Vorgehensweise:

Angenommen, es soll ein System bestehend aus 200 Teilchen, deren relative Fehler sich auf das Intervall $(10^{-3}, 10^{-2})$ verteilen, ausgewertet werden. Dieses Intervall wird in äquidistante Teilintervalle unterteilt, d.h. es gibt folgende Teilintervalle: $I_1 = (10^{-3}, 2 \cdot 10^{-3})$, $I_2 = (2 \cdot 10^{-3}, 3 \cdot 10^{-3})$, $I_3 = (3 \cdot 10^{-3}, 4 \cdot 10^{-3})$, ..., $I_9 = (9 \cdot 10^{-3}, 10^{-2})$. Die Anzahl der relativen Fehler, die sich in einem der Teilintervalle befinden, wird nun aufsummiert, so dass sich folgende Verteilung ergibt:

Teilintervall	Anzahl Fehler
I_1	36
I_2	16
I_3	20
I_4	30
I_5	10
I_6	26
I_7	18
I_8	20
I_9	24

Tabelle 5.1: Beispiel Fehlerverteilungen

Die Anzahl der Fehler, die kleiner als die Obergrenze eines jeden Intervalls ist, wird nun in der dritten Spalte eingetragen:

Teilintervall	Anz. Fehler	Anz. Fehler kleiner als Obergrenze	in %
I_1	36	36	18
I_2	16	52	26
I_3	20	72	36
I_4	30	102	51
I_5	10	112	56
I_6	26	138	69
I_7	18	156	78
I_8	20	176	88
I_9	24	200	100

Tabelle 5.2: Beispiel Fehlerverteilungen mit prozentualer Auswertung

Aus Tabelle 5.2 wird deutlich, dass die Anzahl von 102 relativen Fehlern kleiner als $4 \cdot 10^{-3}$ (I_4) ist, dies entspricht einem prozentualen Anteil von 51 %. Die Gesamtanzahl der relativen Fehler, also 200, befindet sich unterhalb der 10^{-2} Grenze, d.h. 100 % aller Fehler befinden sich unterhalb dieser Schranke.

5.3 Vergleich der θ -gesteuerten MACs

Trägt man die Verteilungsfunktionen, die sich aus der oben beschriebenen Testreihe ergeben, auf, so kommt es zu folgender Abbildung:

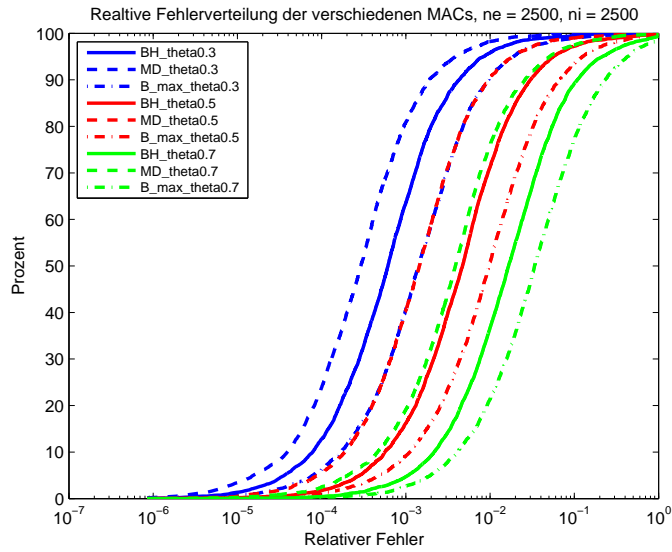


Abbildung 5.9: Fehlerverteilungen der θ -gesteuerten MACs

Zunächst wird hieraus ersichtlich, dass die jeweiligen MACs bei kleinen Werten für θ eine höhere Genauigkeit liefern als bei hohen θ -Werten. Die exakteste Rechnung lieferte bei dieser Testreihe der MD MAC mit $\theta = 0.3$, als schlechteste Approximation stellte sich B_{max} MAC mit $\theta = 0.7$ heraus. Die Verteilungskurven vom B_{max} MAC bei $\theta = 0.3$ und dem MD MAC bei $\theta = 0.5$ zeigen einen fast identischen Verlauf. Ca. 95 % der relativen Fehler liegen unterhalb von $1.90 \cdot 10^{-2}$.

Um eine qualitative Aussage über das Verhalten dieser beiden MACs treffen zu können, müssen nun die Zeiten (in Sekunden), die zur Berechnung eines Zeitschritts benötigt wurden, verglichen werden.

θ/MAC	0.3		0.5		0.7	
	Zeit in s	Genauigkeit	Zeit in s	Genauigkeit	Zeit in s	Genauigkeit
BH	6.48	$8.45 \cdot 10^{-3}$	2.71	$5.68 \cdot 10^{-2}$	1.62	$2.15 \cdot 10^{-1}$
MD	9.03	$3.91 \cdot 10^{-3}$	4.54	$1.89 \cdot 10^{-2}$	3.01	$5.10 \cdot 10^{-2}$
B_{max}	5.52	$1.90 \cdot 10^{-2}$	2.34	$1.26 \cdot 10^{-1}$	1.44	$4.30 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 5.3: Vergleich der Zeiten und der 95 % Genauigkeiten der θ -gesteuerten MACs, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$

Der MD MAC bei $\theta = 0.5$ benötigt 4,54 s zur Berechnung, hingegen vergehen 5.52 s beim B_{max} MAC mit $\theta = 0.3$. Die erreichte Genauigkeit von „95 % der relativen Fehler liegen unterhalb von $1.90 \cdot 10^{-2}$ “ kann also bei Verwendung des MD MAC mit $\theta = 0.5$ ca. 21 % schneller erreicht werden. Eine vergleichbare Situation tritt bei den Konfigurationen MD MAC mit $\theta = 0.7$ und BH MAC mit $\theta = 0.5$ auf. Die Genauigkeit von ca. 95 % der Fehler sind kleiner als $5.68 \cdot 10^{-2}$ kann mit dem BH MAC ($\theta = 0.5$) in 2.71 s und dem MD MAC ($\theta = 0.7$) in 3,01 s erreicht werden. Der BH MAC rechnet bei dieser Genauigkeit also ca. 11 % schneller.

Als möglicher Grund für die Laufzeitdifferenzen bei gleicher Genauigkeit kommt zum einen die unterschiedliche Art und Weise der Programmierung der einzelnen MACs in Frage. Bei der Implementierung des Barnes-Hut MAC wird weniger Rechenaufwand betrieben als beim MD MAC bzw. B_{max} MAC, so dass die gemessenen Zeiten nur bedingt als Vergleichskriterium dienen können. Beide MACs können hinsichtlich der Art ihrer Implementierung noch optimiert werden. Als zweiter und möglicherweise aussagekräftigerer Grund für die Laufzeitdifferenzen kann die unterschiedliche Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten der einzelnen Teilchen genannt werden. Je weniger Multipole ein MAC zum Erreichen einer gewissen Genauigkeit benötigt, desto effizienter arbeitet er. Tabelle 5.4 zeigt die durchschnittliche Anzahl an Multipolen, die zur Potenzialapproximation verwendet wurden.

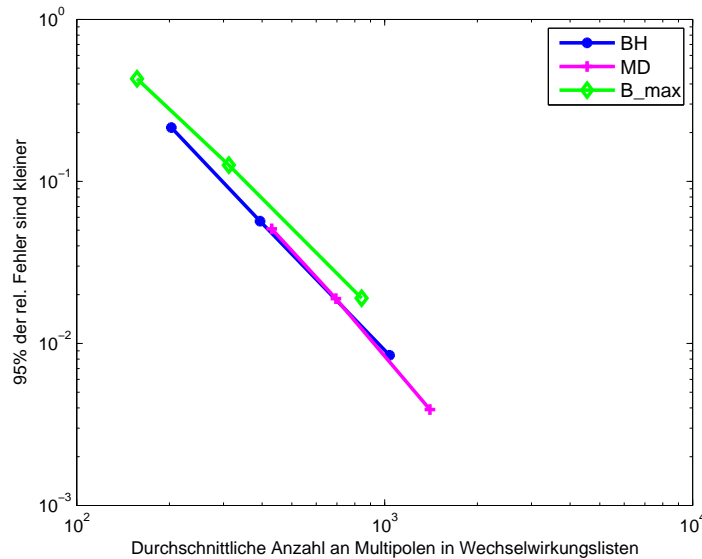


Abbildung 5.10: Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit der θ -gesteuerten MACs, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$

θ/MAC	0.3		0.5		0.7	
	MP	95 % Genauigkeit	MP	95 % Genauigkeit	MP	95 % Genauigkeit
BH	1038	$8.45 \cdot 10^{-3}$	394	$5.68 \cdot 10^{-2}$	203	$2.15 \cdot 10^{-1}$
MD	1404	$3.91 \cdot 10^{-3}$	695	$1.89 \cdot 10^{-2}$	430	$5.10 \cdot 10^{-2}$
B_{max}	842	$1.90 \cdot 10^{-2}$	312	$1.26 \cdot 10^{-1}$	157	$4.30 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 5.4: Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit der θ -gesteuerten MACs, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$

Bei den bereits oben miteinander verglichenen MACs zeigt sich bei der Analyse der Größe der Wechselwirkungslisten ein ähnliches Ergebnis wie bei der Rechenzeitanalyse. Der MD MAC mit $\theta = 0.5$ benötigt durchschnittlich 695 Multipole um eine mit dem B_{max} MAC bei $\theta = 0.3$ vergleichbare Genauigkeit zu erreichen. Letzterer kommt jedoch auf eine durchschnittliche Länge der Wechselwirkungslisten von 842. Dies entspricht einem Mehraufwand von 21 %. Betrachtet man die Anzahl der Multipole des BH MAC mit $\theta = 0.5$ und des MD MAC mit $\theta = 0.7$, stellt man fest, dass der MD MAC ca. 9 % mehr Multipole benötigt. Diese Aussagen über die Länge der Wechselwirkungslisten werden im Folgenden als Effizienzkriterium der einzelnen MACs verwendet, da sie lediglich die Algorithmen und nicht die Art der Implementierung miteinander vergleichen. Aus Abbildung 5.10 wird deutlich, dass der MD MAC und der Barnes-Hut MAC eine ähnlich gute Effizienz aufweisen. Hingegen schneidet der b_{max} MAC bei diesem Vergleich am schlechtesten ab. Eine ähnliche Tendenz ergab sich für eine Testreihe mit ausschließlich positiven Ladungsträgern. Aufgrund dieser Ergebnisse wird im Folgenden als Referenz für die getesteten MACs der Barnes-Hut MAC verwendet.

5.4 Vergleich erweiterter B_{max} MAC mit Barnes-Hut

Anhand der oben beschriebenen Kugelkonfiguration wurde der erweiterte B_{max} MAC für das positive und das neutrale System getestet. In Abbildung 5.11 wird deutlich, dass die Recheneffizienz von Barnes-Hut für beide Systeme signifikant höher liegt als bei der Erweiterung von B_{max} . Auch bei anderen Tests zeigt sich die Erweiterung von B_{max} in dieser Form als ungeeignetes Approximationskriterium. Als möglichen Grund für die, im Vergleich zu Barnes-Hut, schlechtere Recheneffizienz, kann die Art der Abschätzung, die zur Herleitung des erweiterten B_{max} MAC verwendet wurde, genannt werden. Die obere Schranke der Quadrupolterme, B_2 , wurde zur Vereinfachung nochmals durch $\sum_{i=1}^n |q_i| \cdot b_{max}^2$ nach oben abgeschätzt. Dies wird möglicherweise für die meisten Terme zu

grob sein, da der Abstand zwischen den Teilchen bedeutend kleiner ist, als der Maximalabstand b_{max} . Zudem wird die Abschätzung des kritischen Radius r_c durch das Weglassen des Subtraktionsterms B_3 nach oben hin unschärfer.

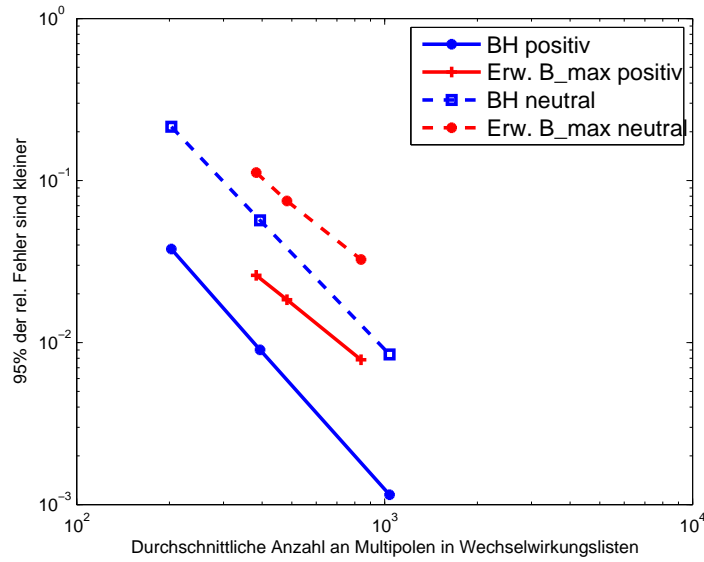


Abbildung 5.11: Effizienzvergleich Barnes-Hut mit erweitertem B_{max}

5.5 Vergleich E-Feld MAC mit Barnes-Hut

5.5.1 Homogene Kugel mit neutraler Ladungsverteilung

Der neu implementierte E-Feld MAC wurde ebenfalls durch die oben beschriebene Teilchenkonfiguration mit α -Werten von 0.1, 0.01, 0.001 und 0.0001 durchlaufen und getestet. Abbildung 5.12 zeigt die Fehlerverteilung des E-Feld MAC für die verschiedenen α -Werte.

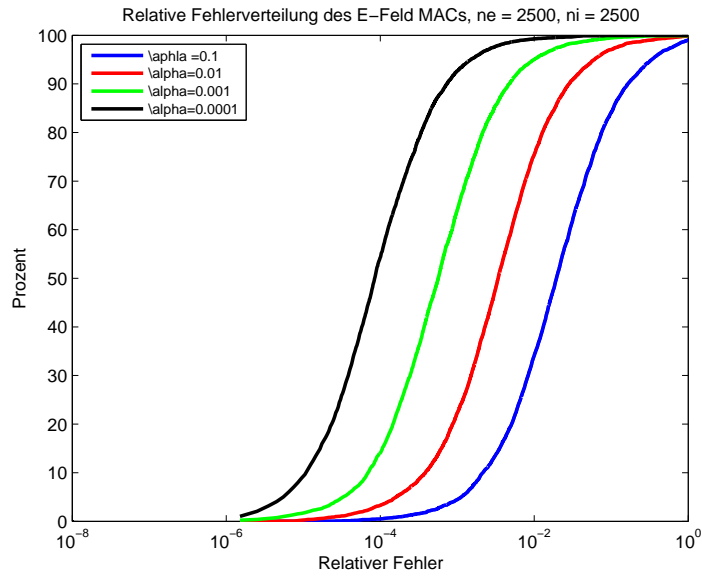


Abbildung 5.12: Fehlerverteilungen E-Feld MAC, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$

Zunächst einmal wird deutlich, dass bei fallenden α -Werten die Genauigkeit der Potenzialapproximation steigt. Für α gegen 0 strebt der relative Fehler der Potenziale ebenfalls gegen 0. Tabelle 5.5 zeigt die 95 % Genauigkeiten und die Anzahl der Multipole der Wechselwirkungslisten des E-Feld MAC im Vergleich zum Barnes-Hut MAC.

MAC	Anzahl Multipole	95 % Genauigkeit
BH $\theta = 0.3$	1038	$8.45 \cdot 10^{-3}$
E-Feld $\alpha = 0.001$	1069	$1.01 \cdot 10^{-2}$
BH $\theta = 0.5$	394	$2.15 \cdot 10^{-2}$
E-Feld $\alpha = 0.01$	485	$3.37 \cdot 10^{-2}$
BH $\theta = 0.7$	203	$5.68 \cdot 10^{-2}$
E-Feld $\alpha = 0.1$	206	$6.04 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 5.5: Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit von Barnes-Hut und E-Feld MAC, homogene Kugel mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$

Aus diesen Werten wird deutlich, dass der Barnes-Hut MAC eine höhere Genauigkeit als der E-Feld MAC erzielt, obwohl er weniger Multipole zur Potenzialberechnung benötigt. Bei fast identischen Werten der durchschnittlichen Anzahl an Multipolen von 203 beim Barnes-Hut MAC bzw. 206 beim E-Feld MAC erreicht Barnes-Hut eine 95 % Genauigkeit, die im Vergleich um ca. 1.5 mal höher liegt. Aus Abbildung 5.13 wird deutlich, dass die übrigen Werte eine ähnliche Tendenz aufweisen. Die Effizienz von Rechengenauigkeit zu Rechenaufwand liegt also bei Barnes-Hut für diese Konfiguration deutlich höher als beim E-Feld MAC.

5.5.2 Homogene Kugel mit rein positiver Ladungsverteilung

In der folgenden Versuchsreihe wurden der Barnes-Hut MAC und der E-Feld MAC anhand einer Kugelkonfiguration aus 5000 positiv geladenen Teilchen getestet. Die Verteilung der Teilchen innerhalb der Kugel wurde auch hier zufällig gewählt. Der einzige Unterschied zu der oben genannten Konfiguration liegt darin, dass die Ladung des Gesamtsystems nicht neutral, sondern positiv, $\sum_{i=1}^{5000} q_i = 5000$, ist. Nimmt man auch hier als Vergleichskriterium die Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und die damit erreichte Rechengenauigkeit, so ergibt sich Tabelle 5.6.

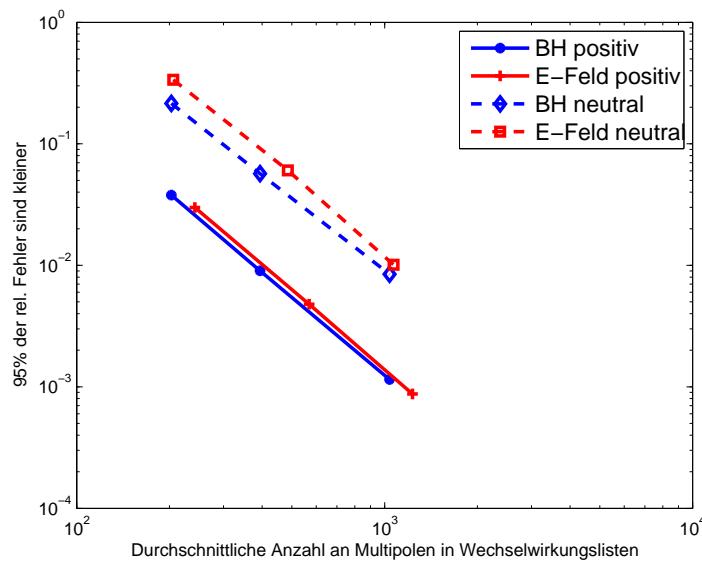


Abbildung 5.13: Anzahl Multipole zu relativem Fehler

MAC	Anzahl Multipole	95 % Genauigkeit
BH $\theta = 0.3$	1038	$1.15 \cdot 10^{-3}$
E-Feld $\alpha = 0.0001$	1232	$8.73 \cdot 10^{-4}$
BH $\theta = 0.5$	394	$9.02 \cdot 10^{-3}$
E-Feld $\alpha = 0.001$	569	$4.78 \cdot 10^{-3}$
BH $\theta = 0.7$	203	$3.78 \cdot 10^{-2}$
E-Feld $\alpha = 0.01$	242	$2.99 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 5.6: Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit von Barnes-Hut und E-Feld MAC, homogene Kugel mit $n_e = 5000$, $n_i = 0$

In Abbildung 5.13 wurden die 95 % Genauigkeiten im Verhältnis zum Rechenaufwand der beiden Kugelkonfigurationen aufgetragen. Die Kurven der beiden MACs weisen im geladenen Teilchensystem einen kleineren Abstand zueinander auf als im neutralen System. Deutlich wird hieraus, dass im Vergleich zu Barnes-Hut die Recheneffizienz des E-Feld MAC bei der positiv geladenen Kugel höher ausfällt als im neutralen System. Im direkten Vergleich erreichen die beiden MACs im positiv geladenen System eine fast identische Recheneffizienz.

5.5.3 Plummerverteilte Teilchen

Mit Hilfe der Plummerverteilung, s. Formel (3.9), wurden ein neutrales und ein positives System mit jeweils 5000 Teilchen generiert.

MAC	Anzahl Multipole	95 % Genauigkeit
BH $\theta = 0.3$	1702	$8.85 \cdot 10^{-4}$
E-Feld $\alpha = 0.0001$	1437	$8.35 \cdot 10^{-4}$
BH $\theta = 0.5$	818	$6.35 \cdot 10^{-3}$
E-Feld $\alpha = 0.001$	692	$4.97 \cdot 10^{-3}$
BH $\theta = 0.7$	456	$2.39 \cdot 10^{-2}$
E-Feld $\alpha = 0.01$	315	$2.60 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 5.7: Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit von Barnes-Hut und E-Feld MAC, Plummerverteilung mit $n_e = 5000$, $n_i = 0$

Aus Tabelle 5.7 und Abbildung 5.14 wird deutlich, dass der E-Feld MAC bei dem positiven, plummerverteilten System erstmals eine höhere Recheneffizienz aufweist als der Barnes-Hut MAC. Mit einer Anzahl von durchschnittlich 1437 Multipolen pro Wechselwirkungsliste erreicht der E-Feld MAC eine 95 % Genauigkeit von $8.35 \cdot 10^{-4}$. Barnes-Hut benötigt für eine vergleichbare Rechengenauigkeit von $8.85 \cdot 10^{-4}$ im Mittel 1702 Multipole. Der E-Feld MAC rechnet in diesem Beispiel um mehr als 18 % genauer. Die Messwerte für die geringeren Rechengenauigkeiten weisen beim

positiven System eine vergleichbare Tendenz auf, s. Tabelle 5.7.

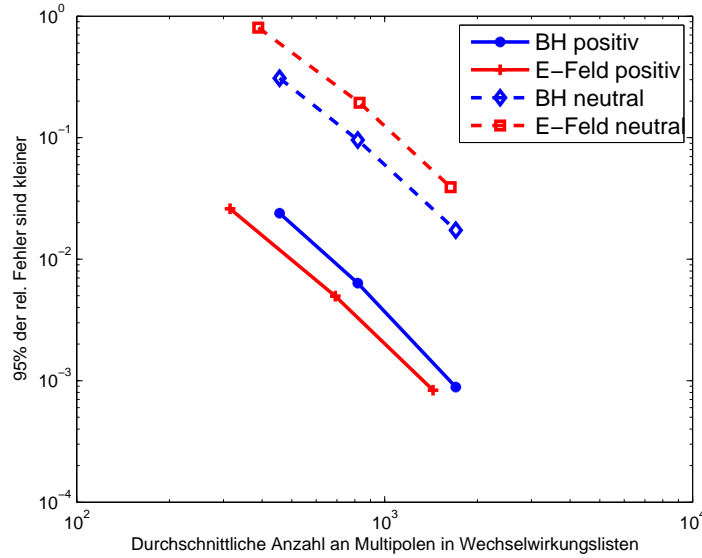


Abbildung 5.14: Anzahl Multipole zu relativem Fehler

MAC	Anzahl Multipole	95 % Genauigkeit
BH $\theta = 0.3$	1702	$1.73 \cdot 10^{-2}$
E-Feld $\alpha = 0.001$	1638	$3.91 \cdot 10^{-2}$
BH $\theta = 0.5$	818	$9.56 \cdot 10^{-2}$
E-Feld $\alpha = 0.01$	829	$1.94 \cdot 10^{-1}$
BH $\theta = 0.7$	456	$3.09 \cdot 10^{-1}$
E-Feld $\alpha = 0.01$	389	$8.04 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 5.8: Vergleich Anzahl der Multipole in den Wechselwirkungslisten und der 95 % Genauigkeit von Barnes-Hut und E-Feld MAC, Plummerverteilung mit $n_e = 2500$, $n_i = 2500$

Im neutralen Fall wird aus Tabelle 5.8 und Abbildung 5.14 ersichtlich, dass hier, ähnlich wie bei der Kugelkonfiguration, der Barnes-Hut MAC eine höhere Recheneffizienz liefert.

Einen möglichen Grund für die schlechtere Effizienz des E-Feld MAC in neutralen Ladungssystemen, liefert die Abschätzung von $\sum_{i=1}^n q_i$ mit $\sum_{i=1}^n |q_i|$. Diese wird bei Multipolen mit neutraler oder annähernd neutraler Ladungsverteilung zu grob. Betrachtet man beispielsweise einen Multipol, der sowohl aus 50 positiven als auch aus 50 negativen Teilchen besteht, so ist $\sum_{i=1}^{100} q_i = 0$ und $\sum_{i=1}^{100} |q_i| = 100$. Für rein positive Ladungsverteilungen findet an dieser Stelle keine Abschätzung statt, da die Summe der Ladungen gleich der Summe der Beträge der Ladungen ist. Die für den E-Feld MAC hergeleitete Formel ist also in rein positiven Systemen genauer. Verwendet man im

neutralen System $|\sum_{i=1}^n q_i|$ als Abschätzung für $\sum_{i=1}^n q_i$, tritt das Problem auf, dass der MAC den Multipol auf der obersten Stufe des Baums, also den Multipol, der das gesamte Simulationsgebiet umfasst, akzeptiert. Da seine Gesamtladung $|\sum_{i=1}^N q_i| = 0$ ist, wird er in die Wechselwirkungsliste jedes Teilchens, s. Formel (4.21), aufgenommen. Die dabei auftretenden Kraft- bzw. Potenzialwerte besitzen keine physikalische Aussagekraft.

Auffällig an den Auswertungen aller Effizienztests ist, dass die Größenordnung der relativen Fehler im neutralen System höher liegt, als im positiven System. Den Grund für diesen Unterschied liefert die Tatsache, dass die Kräfte bzw. Potenziale bei rein positiven Ladungsträgern, absolut gesehen, größer ausfallen. So wird, bei gleicher Größenordnung des absoluten Fehlers, der relative Fehler bei höheren Potenzial- bzw. Kraftwerten kleiner.

Kapitel 6

Zusammenfassung

Die in dieser Arbeit neu implementierten MACs hatten zum Ziel, die aufgrund zu vieler Ausreißer schlechte Approximation des Barnes-Hut MAC bei mehrfach verklumpter Verteilung zu vermeiden und die Recheneffizienz bei den gegebenen Ladungsverteilungen zu verbessern.

Betrachtet man die Tests, die für mehrfach verklumpfte Verteilungen durchgeführt wurden, so wird deutlich, dass die Schwächen von Barnes-Hut durch die Verwendung des MD-MAC behoben werden konnten. Aufgrund sehr kleiner Fehler und keinen Ausreißern, relative Fehler größer als 0.6, bietet MD die beste Approximation.

Bei der Auswertung der Recheneffizienztests für die Kugelkonfigurationen zeigt sich ebenfalls der MD-MAC zusammen mit Barnes-Hut als effektivstes Kriterium. Sowohl im neutralen als auch im positiven Ladungssystem erzielten beide MACs eine höhere Recheneffizienz als B_{max} . Die Erweiterung von B_{max} erbrachte keine Verbesserung.

Durch die Implementierung des E-Feld MACs wird erstmals Information über die Teilchen, in Form des elektrischen Felds aus dem vorherigen Zeitschritt, zur Berechnung der Wechselwirkungslisten verwendet. Zunächst zeigt sich für die Kugelkonfigurationen keine Verbesserung der Effizienz. Erst für ein positiv geladenes, plummerverteiltes System erlangt man durch den E-Feld MAC ein verbessertes Verhältnis zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand.

Grundsätzlich lässt sich festhalten, dass keiner der getesteten MACs für alle gegebenen Konfigurationen die beste Effizienz bietet. Bei der Simulation von neutralen bzw. bei mehrfach verklumpten Systemen bietet sich der MD MAC an, weil er erstens ohne Ausreißer in den Fehlern auskommt und zweitens eine gute Recheneffizienz bietet. Für rein positive Teilchenverteilungen zeigten sowohl

Barnes-Hut als auch MD gleich effiziente Approximationen. Bei einem positiven, plummerverteilten System zeigte sich der E-Feld MAC als effektivstes Kriterium.

Kapitel 7

Ausblick

Die in PEPC implementierten MACs können nun für physikalische Simulationen verwendet werden. Die hier aufgezeigten Vor- und Nachteile sollten bei gegebener Startverteilung die Wahl des MAC beeinflussen. Durch die Einbettung der neuen MACs in die FCS Bibliothek wird es dem Benutzer in Zukunft gestattet sein, zwischen den einzelnen MACs auszuwählen.

Neben den sehr guten Approximationseigenschaften bietet der MD-MAC gegenüber den anderen MACs einen weiteren Vorteil. In der parallelen Version von PEPC tauschen die einzelnen Prozessoren zur Berechnung der Kräfte bzw. Potenziale einige Eigenschaften der einzelnen Multipole aus. Bei Barnes-Hut bzw. B_{max} müssen zur Überprüfung des MAC die Ladungszentren der Multipole bekannt sein. MD reicht der Schlüssel des Multipols aus um den MAC durchführen zu können. Über die Schlüssellänge lässt sich, wie beschrieben, die Länge der Box und über die Nummerierung die Lage der Box errechnen. Die Verwendung des MD-MAC in der parallelen Version von PEPC kann also den Austausch von 3 real-Werten (x-, y-, z-Komponente) pro Austausch vermeiden. An einem Beispiel wird gezeigt, wieviel Kommunikationsersparnis der Gebrauch von MD bewirkt. Bei den Kugelkonfigurationen benötigt MD mit $\theta = 0.3$ durchschnittlich 1404 Multipole. Geht man davon aus, dass bei 4 Prozessoren jeder ein Viertel der Daten lokal speichert, so muss jeder Prozessor $\frac{3}{4} \cdot 1404 = 1053$ Multipole von den anderen empfangen. Es finden also insgesamt $4 \cdot 1053 = 4212$ Datenaustausche pro Zeitschritt statt. Nimmt man für die Größe eines real-Werts 64 Bit, also 8 Byte, an, so spart man die Übermittlung von $8 \cdot 4212 = 33696$ Byte. Bei 50000 Teilchen und ähnlichen Bedingungen wären es bereits ca 2.4 MByte Ersparnis pro Zeitschritt.

Je größer die Teilchenanzahl und je länger die Simulationszeit, desto deutlicher zeigt sich der Vor-

teil dieser Kommunikationsersparnis.

Eine Version, die diesen Vorteil von MD nutzt, wird in Zukunft in PEPC implementiert werden.

Anhang A

Taylorscher Satz

Definition:

1. Sei $\vec{h} = (h_1, \dots, h_n)$ mit $h_i \in \mathbb{R}$, dann ist der Differentialoperator $\vec{h} \cdot \nabla$ für eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f \in C^1(X)$ definiert durch:

$$(\vec{h} \cdot \nabla f)(x) = \sum_{i=1}^n h_i \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)$$

2. Für $k \in \mathbb{N}$ sei der Differentialoperator $(\vec{h} \cdot \nabla f)^k$ für die Funktion $f : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f \in C^k(X)$ definiert durch:

$$(\vec{h} \cdot \nabla f)^k(x) = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_k=1}^n h_{\nu_1} \cdot \dots \cdot h_{\nu_k} \frac{\partial f^k}{\partial x_{\nu_1} \dots \partial x_{\nu_k}}(x)$$

Satz:

Es sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und $f \in C^{m+1}(X)$; es seien $x^0, x \in X$, und die Verbindungsstrecke $\overline{x^0 x}$ sei ganz in X enthalten.

Dann gilt mit $\vec{h} = \vec{x} - \vec{x}^0$ für ein geeignetes $\vartheta \in (0, 1)$:

$$f(\vec{x}) = f(\vec{x}^0) + \sum_{k=1}^m \frac{((\vec{h} \cdot \nabla f)^k)(\vec{x}^0)}{k!} + \frac{(\vec{h} \cdot \nabla f)^{m+1}(\vec{x}^0 + \vartheta \vec{h})}{(m+1)!} \quad (\text{A.1})$$

Literaturverzeichnis

- [1] Susanne Pfalzner und Paul Gibbon
Many-body tree methods in physics
Cambridge University Press, 1996
- [2] Volker Springel and Naoki Yoshida and Simon D.M. White
A code for collisionless and gasdynamical cosmological simulations
New Astronomy, Seiten 81 - 86, Juni 2001
- [3] John K. Salmon and Michael Warren
Skeletons from the Treecode Closet
Journal of Computational Physics 111, Seiten 136 - 155, 1994
- [4] John K. Salmon and Michael Warren
A portable parallel particle program
Computer Physics Communications, Seiten 266 - 290, 1995
- [5] Youssef M. Marzouk and Ahmed F. Ghoniem
K-means clustering for optimal partitioning and dynamic load balancing of parallel hierarchical N-body simulations
Journal of Computational Physics 207, Seiten 493 - 528, 2005
- [6] Walter Dehnen
A very fast and momentum-conserving tree code
The Astrophysical Journal 536, Seiten 39 - 42, Juni 2000
- [7] Paul Gibbon
PEPC: Pretty Efficient Parallel Coulomb-solver

- Technical Report, Zentralinstitut für angewandte Mathematik, FZJ
FZJ-ZAM-IB-2003-05, Mai 2003
- [8] Rüdiger Esser, Peter Grassberger, Johannes Grotendorst und Marius Lewerenz
Molecular Dynamics on Parallel Computers
John von Neumann Institute for Computing (NIC), Februar 1999
- [9] Kurt Endl and Wolfgang Luh
Analysis 2
AULA-Verlag Wiesbaden, 1984
- [10] Jan Krautwurst
Implementierung einer Software-Bibliothek für schnelle Coulomb-Löser
Zentralinstitut für angewandte Mathematik, FZJ
FZJ-ZAM-IB-2006-03, Februar 2006
- [11] Falk Eilenberger
Implementation of tabulated Barnes-Hut-Ewald algorithm for periodic boundaries in PEPC
Gaststudentenprogramm, Zentralinstitut für angewandte Mathematik, FZJ, 2006
- [12] Homepage des JSC mit Beschreibung von PEPC
<http://www.fz-juelich.de/jsc/pepc>
- [13] Homepage der CAMS Gruppe
<http://www.fz-juelich.de/jsc/cams>